Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

ФГАОУ ВО «УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»
Физико-технологический институт

ФИЗИКА. ТЕХНОЛОГИИ. ИННОВАЦИИ
ФТИ-2023

X Международная молодежная научная конференция, посвященная 120-летию со дня рождения академиков И.В. Курчатова и А.П. Александрова

Екатеринбург, 15–19 мая 2023 г.

Тезисы докладов

Екатеринбург
ИЗДАТЕЛЬСТВО АМБ
2023

УДК 001.895:621.039 (063)
ББК 22.31я43+24.13я43+32.97я43
Ф48

Редакционная коллегия:
И. С. Жидков, Е. Д. Нархов, И. В. Кашин,
М. Д. Пышкина, Е. А. Бунтов, В. С. Семенищев, А. С. Дедюхин,
М. И. Сутормина, А. А. Смирнов, Д. А. Метелев, А. В. Ищенко.

Физика. Технологии. Инновации. ФТИ-2023 [Текст: электронный ресурс] : тезисы докладов X Международной молодежной научной конференции, Екатеринбург, 15–19 мая 2023 г. / отв. за вып. А. В. Ищенко. – Электрон. дан. (1 файл : 24 Мбайт) – Екатеринбург : УрФУ, ИЗДАТЕЛЬСВО АМБ, 2023. — Режим доступа: https://elibrary.ru/item.asp?id=53963617

Ф48

ISBN 978-5-6050040-2-8

В сборнике опубликованы тезисы устных и стендовых докладов, представленных на научной конференции Физико-технологического института УрФУ молодых ученых, аспирантов и студентов X Международной молодежной научной конференции «Физика. Технологии. Инновации. ФТИ-2023». Конференция посвящена обсуждению вопросов по перспективным направлениям развития науки и техники и проводится при поддержке Физико-технологического института УрФУ и Эндаумент фонда «Физтех».

УДК 001.895:621.039 (063)
ББК 22.31я43+24.13я43+32.97я43

ISBN 978-5-6050040-2-8

©УрФУ, 2023
©Авторы, 2023
© Публикация. ООО «ИЗДАТЕЛЬСТВО АМБ», 2023

СОДЕРЖАНИЕ

СЕКЦИЯ 1. ЯДЕРНЫЕ И РАДИАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

ПЕРВОПРИНЦИПНОЕ ИЗУЧЕНИЕ ПОВЕДЕНИЯ ТРИТИЯ В РАСПЛАВЛЕННОЙ СОЛЕВОЙ СМЕСИ FLiBe

Анисимов А.Ф., Воробьёв А.С., Галашев А.Е. *48*

МОДЕЛЬ ДИНАМИКИ СОДЕРЖАНИЯ 131-I В ЩИТОВИДНОЙ ЖЕЛЕЗЕ И СУТОЧНОМ УДОЕ МОЛОКА ДОЙНЫХ КОРОВ

Басова М.А., Снегирёв А.С., Козьмин Г.В. *50*

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАЩИТНЫХ СВОЙСТВ ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИТОВ С ПУЦЦОЛАНОМ ОТ ГАММА ИЗЛУЧЕНИЯ

Чалпанов С.В., Бессонов И.А., Бреусова А.А., Ташлыков О.Л., Аладаилах М.В. *52*

ОЦЕНКА КРИТИЧЕСКОЙ ДОЗЫ ^{131}I В ЩИТОВИДНОЙ ЖЕЛЕЗЕ КРУПНОГО РОГАТОГО СКОТА

Денисова Э.Н., Кураченко Ю.А. *54*

ПОВЫШЕНИЕ ТОЧНОСТИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ИНДИВИДУАЛЬНОГО ЭКВИВАЛЕНТА ДОЗЫ $H_P(10)$

Гангур П.В., Ташлыков О.Л., Никитенко В.О. *56*

ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЛЯ ТЕМПЕРАТУР И ТЕПЛОВЫХ ПОТОКОВ В АКТИВНОЙ ЗОНЕ ЯДЕРНОГО РЕАКТОРА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ТОРИЕВОГО ТОПЛИВА

Гоглачев А.В., Мясникова В.А. *58*

ПОЛИЭТИЛЕН ВЫСОКОЙ ПЛОТНОСТИ, НАПОЛНЕННЫЙ ПУЦЦОЛАНОЙ, КАК МАТЕРИАЛ ПОЛИМЕРНОЙ РАДИАЦИОННОЙ ЗАЩИТЫ

Гречишкин Р.О., Самбурских Д.С., Аладаилах М.В., Ташлыков О.Л. *60*

НЕКОТОРЫЕ АСПЕКТЫ ГИДРОДИНАМИКИ ДВУХФАЗНОГО ПОТОКА В ТЕПЛООБМЕННОЙ ТРУБКЕ ВЫПАРНОГО ПЛЕНОЧНОГО АППАРАТА, ПРЕДНАЗНАЧЕННОГО ДЛЯ КОНЦЕНТРИРОВАНИЯ ВАО

Гушшамова В.Н., Хомяков А.П., Морданов С.В., Хомякова Т.В. *62*

РАЗРАБОТКА ИОННОГО ИСТОЧНИКА ДЛЯ КАМЕРЫ ИНЕРЦИАЛЬНОГО ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОГО УДЕРЖАНИЯ ПЛАЗМЫ

Ильичев И.В., Прокуратов И.А. *64*

ВЛИЯНИЕ ТЕХНОЛОГИИ ИЗГОТОВЛЕНИЯ ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ЭПОКСИДНОЙ СМОЛЫ, ЗАПОЛНЕННОЙ ОКСИДОМ СВИНЦА, НА РАДИАЦИОННО-ЗАЩИТНЫЕ СВОЙСТВА

Юзбашиева К.Ш., Касков Д.О., Воложенинов Т.П., Ташлыков О.Л. 66

ОЦЕНКИ МОЩНОСТЕЙ ДОЗ ОТ ГАММА-ИЗЛУЧЕНИЯ ПРИРОДНЫХ РАДИОНУКЛИДОВ В СТРОИТЕЛЬНЫХ МАТЕРИАЛАХ СОВРЕМЕННЫХ ЖИЛЫХ ЗДАНИЙ

Изгагин В.С., Жуковский М.В., Онищенко А.Д. 68

ПЛОТНОСТЬ ЭНЕРГИИ ФИЗИЧЕСКОГО ВАКУУМА И ОЦЕНКА МАССЫ КОМПАКТНОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ (ee) - ПАРЫ

Кащенко Н.М., Кащенко М.П. 70

ОЦЕНКА МИНИМАЛЬНЫХ ЭНЕРГИЙ ЭЛЕКТРОННЫХ (ee) - ПАР ДЛЯ РЕАКЦИЙ СИНТЕЗА МАССИВНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

Кащенко Н.М., Кащенко М.П. 72

АЛЬТЕРНАТИВНЫЙ СПОСОБ УТИЛИЗАЦИИ ЗАГРЯЗНЕННОЙ МОРСКОЙ ВОДЫ НА АЭС «ФУКУСИМА-1»

Касков Д.О., Воложенинов Т.П., Ташлыков О.Л., Юзбашиева К.Ш. 74

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ КЛАССИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ ЯДЕРНОГО РЕАКТОРА И КИНЕТИКИ МАРКОВСКОЙ ЦЕПНОЙ ЯДЕРНОЙ РЕАКЦИИ ДЕЛЕНИЯ

Комарова Я.О., Михайлова П.А., Ошканов Н.Н. 76

ИССЛЕДОВАНИЕ РАДИАЦИОННОЙ СТОЙКОСТИ МОНОКРИСТАЛЛОВ И ОПТИЧЕСКОЙ КЕРАМИКИ НА ОСНОВЕ ГАЛОГЕНИДОВ ТАЛЛИЯ И СЕРЕБРА

Кондрашин В.М., Салимгареев Д.Д., Львов А.Е., Южакова А.А., Корсаков А.С., Жукова Л.В. 78

О ВОЗМОЖНОСТЯХ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ АЛЬФА-БЕТА-РАДИОМЕТРА УМФ−2000−М С ПРОГРАММНЫМ ОБЕСПЕЧЕНИЕМ “SPDEC” ДЛЯ АЛЬФА-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКИХ ИЗМЕРЕНИЙ

Космычёв А.С., Семенищев В.С. 80

ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАВИСИМОСТИ ПЛОТНОСТИ ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ ОТ ТЕХНОЛОГИИ ИЗГОТОВЛЕНИЯ

Кувшинова Е.В., Широнина А.М., Ташлыков О.Л., Аладаилах М.В. 82

ОЦЕНКА РАДИАЦИОННЫХ РИСКОВ ПРИ РАСПРЕДЕЛЕННОМ ВО ВРЕМЕНИ ОБЛУЧЕНИИ

Макеева Е.С., Жуковский М.В. 84

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ИМПУЛЬСНОГО НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО ПРОТОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА РАБОТОСПОСОБНОСТЬ МИКРОКОНТРОЛЛЕРА
Марчук М.В., Дубровских С.М. 86

РАСЧЕТ НЕЙТРОНОВОДНОЙ СИСТЕМЫ ДЛЯ ДИФРАКТОМЕТРА НА КОМПАКТНОМ ИСТОЧНИКЕ НЕЙТРОНОВ DARIA
Матюхов В.В., Кравцов Е.А. 89

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕТЕКТИРУЮЩЕЙ СИСТЕМЫ GABRIELA
Мажарцева А.А., Мухин Р.С. 91

ВОССТАНОВЛЕНИЕ СПЕКТРОВ ТКЕ ОСКОЛКОВ СПОНТАННОГО ДЕЛЕНИЯ
Миронова А.Е., Мухин Р.С. 93

МЕТОД РЕТРОСПЕКТИВНОЙ ОЦЕНКИ РАДИАЦИОННОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ УГЛЕРОДА-14 ПРИ НОРМАЛЬНОЙ ЭКСПЛУАТАЦИИ ЯДЕРНЫХ РЕАКТОРОВ
Назаров Е.И., Екидин А.А. 95

ЦИФРОВАЯ МОДЕЛЬ ПЛОЩАДНЫХ ИСТОЧНИКОВ ВЫБРОСА РАДИОАКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ ДЛЯ ОЦЕНКИ РАДИАЦИОННОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА ПРИМЕРЕ ТЕЧЕНСКОГО КАСКАДА ВОДОЕМОВ
Назарович А.В., Екидин А.А., Антонов К.Л., Васянович М.Е., Пыхов О.А. 97

ИССЛЕДОВАНИЕ УРОВНЯ ФОНОВОГО ОБЛУЧЕНИЯ НЕЙТРОННЫМ ИЗЛУЧЕНИЕМ
Паньшин И.Д., Пышкина М.Д. 99

РАСЧЕТ НЕЙТРОНОВОДНОЙ СИСТЕМЫ ДЛЯ РЕФЛЕКТОМЕТРА НА КОМПАКТНОМ ИСТОЧНИКЕ НЕЙТРОНОВ DARIA
Попов А.И., Кравцов Е.А. 100

ИЗМЕРЕНИЕ РАДИАЦИОННОГО ФОНА Д. НИЖНЯЯ ИЛЕНКА БАЙКАЛОВСКОГО РАЙОНА СВЕРДЛОВСКОЙ ОБЛАСТИ
Сабанин К.А., Екидин А.А. 102

УЛУЧШЕНИЕ РАДИАЦИОННО-ЗАЩИТНЫХ СВОЙСТВ ДИАМИТОВЫХ ГЛИНИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ДАВЛЕНИЯ
Широнина А.М., Воронин И.П., Бодуленко С.Е., Махмуд К.Г., Ташлыков О.Л. 104

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ И УГЛОВОЙ ЗАВИСИМОСТЕЙ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ НЕЙТРОННЫХ ДОЗИМЕТРОВ
Спиридонова И.С. 106

РАДИОЭКОЛОГИЧЕСКИЙ МОНИТОРИНГ ПОЧВ Г. ЕКАТЕРИНБУРГА
Султанова У.А., Воронина А.В. *107*

РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ ДЕЗАКТИВАЦИИ ТРУБОПРОВОДОВ АЭС
Сурганов О.А., Сергеев А.Н., Шастин А.Г., Щеклеин С.Е. *109*

РЕШЕНИЕ ПРОБЛЕМЫ ПЕРЕВОДА ЯДЕРНОГО РЕАКТОРА В ПОДКРИТИЧЕСКИЙ РЕЖИМ МЕТОДОМ МАРКОВСКОЙ ЦЕПИ
Ваулин Г.Е., Метельникова М.А., Ошканов Н.Н. *111*

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИТОВ В СРЕДСТВАХ ПЕРСОНАЛЬНОЙ РАДИАЦИОННОЙ ЗАЩИТЫ
Воложенинов Т.П., Касков Д.О., Ташлыков О.Л., Юзбашиева К.Ш. *113*

КОНСЕРВАТИВНАЯ ОЦЕНКА АКТИВНОСТИ ПЫЛИ В НАСЕЛЕННОМ ПУНКТЕ
Яковлев А.С., Екидин А.А. *115*

РАЗРАБОТКА МУЛЬТИСФЕРНОГО СПЕКТРОМЕТРА НЕЙТРОНОВ, ЧУВСТВИТЕЛЬНОГО К УГЛУ ПАДЕНИЯ ИЗЛУЧЕНИЯ
Юмагуен Р.Р., Пышкина М.Д. *117*

ОЦЕНКА РАДИАЦИОННЫХ РИСКОВ НА ТЕРРИТОРИЯХ С ПОВЫШЕННЫМ СОДЕРЖАНИЕМ ТЕХНОГЕННЫХ РАДИОНУКЛИДОВ
Зигангиров А.Р., Марчук М.В., Екидин А.А. *119*

СЕКЦИЯ 2. ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

ПЛОТНОСТЬ И ЭЛЕКТРИЧЕСКОЕ СОПРОТИВЛЕНИЕ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНОГО СПЛАВА AlCoNiCuZr
Русанов Б.А., Агапова Ю.К., Стерхов Е.В., Русанова А.И., Сидоров В.Е. *122*

СДВИГ ОПТИЧЕСКОЙ ЩЕЛИ В МОНОКРИСТАЛЛАХ ГИБРИДНОГО ПЕРОВСКИТА $CH_3NH_3PbBr_3$
Ахатов М.В., Сарычев М.Н., Жевстовских И.В., Семенова О.И. *124*

СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ И МЕТАСТАБИЛЬНЫЕ СОСТОЯНИЯ В СУЛЬФИДЕ $Co_{0.56}Cr_{0.4}S$
Акрамов Д.Ф., Селезнева Н.В., Шишкин Д.А., Казанцев В.А., Баранов Н.В. *126*

THE EFFECT OF Tb AND Mn ON THE INTERCHANGE INTERACTION FOR $La_{0.2}Tb_{0.8}Mn_2Si_2$ AND $La_{0.4}Tb_{0.6}Mn_2Si_2$

Alsafi Haneen M, Gerasimov E. G., Borisova P. A., Glazkov V. P., Dujeva E. V., Pirogov A.N. *128*

ОЦЕНКА ТОЧНОСТИ И СКОРОСТИ ВЫЧИСЛЕНИЙ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ НА ОСНОВЕ ПОТЕНЦИАЛА МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ УГЛЕРОДНЫХ СТРУКТУР

Арсланов К.П., Бунтов Е.А. *130*

ВЛИЯНИЕ СРЕДЫ ТЕРМООБРАБОТКИ НА СТРУКТУРНЫЕ ПАРАМЕТРЫ ТОНКИХ ПЛЕНОК NiO

Артемьев М.С., Изюров В.В., Меренцова К.А., Десятников И.А., Дубинин С.С., Носов А.П. *132*

ПОЛУМЕТАЛЛИЧЕСКИЕ И ПОЛУПРОВОДНИКОВЫЕ СОСТОЯНИЯ В ЗОННОЙ СТРУКТУРЕ RSb И RNiSb, ГДЕ R = Tb, Dy, Ho

Байдак С.Т., Лукоянов А.В. *134*

ЗАВИСИМОСТЬ КАРТИН КАУСТИКИ МАГНИТОУПРУГИХ ВОЛН ОТ МАГНИТНОГО ПОЛЯ В КРИСТАЛЛАХ $Fe_{82}Ga_{18}$

Бахарев С.М., Борич М.А., Савченко С.П. *136*

СВОЙСТВА МОНОКРИСТАЛЛОВ И ОПТИЧЕСКОЙ КЕРАМИКИ НА ОСНОВЕ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ СИСТЕМЫ $AgCl_{0,25}Br_{0,75}$ - AgI

Барыкина С.Е., Щукина А.А., Жукова Л.В. *138*

МАГНИТО-ОПТИЧЕСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ТОПОЛОГИЧЕСКОГО ИЗОЛЯТОРА $Bi_{1.1}Sb_{0.9}Te_2S$

Беляев Д.В., Якушев М.В., Орлита М., Гребенников В.И., Кох К.А., Терещенко О.Е., Кузнецова Т.В. *140*

ИЗМЕНЕНИЕ ГИДРОФИЛЬНОСТИ И ГИДРОФОБНОСТИ МАТЕРИАЛОВ ПРИ НАНЕСЕНИИ ГРАФЕНА

Бетке И. А. *143*

КОНЦЕНТРАЦИОННЫЕ ЗАВИСИМОСТИ ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЯ ТРОЙНЫХ И БИНАРНЫХ СПЛАВОВ ПРИ МАКСИМАЛЬНОМ ДАЛЬНЕМ ПОРЯДКЕ

Бородин К.И., Волков В.А. *145*

ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА ПОРОШКОВ АНИОНОДЕФИЦИТНОГО КОРУНДА

Бояринцев А.И., Абашев Р.М., Сюрдо А.И. *147*

ВЛИЯНИЕ ТЕРМОМАГНИТНОЙ ОБРАБОТКИ НА АНИЗОТРОПИЮ ГИСТЕРЕЗИСНЫХ СВОЙСТВ ТОНКИХ ПЛЕНОК Ni

Быкова А.А., Горьковенко А.Н., Васьковский В.О. *149*

ОСОБЕННОСТИ СПЕКТРАЛЬНО-РАЗРЕШЕННОЙ ТЕРМОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ В НАНОВИСКЕРАХ НИТРИДА АЛЮМИНИЯ

Чайкин Д.В., Спиридонов Д.М., Вохминцев А.С., Вайнштейн И.А. *151*

ОСОБЕННОСТЬ РАСПРОСТРАНЕНИЯ СВЕТОВЫХ ПУЛЬ В АНИЗОТРОПНОМ ФОТОННОМ КРИССТАЛЕ ПРИ ТУНЕЛЬНОЙ ИОНИЗАЦИИ

Челнынцев И.А., Шилов Т.Б., Двужилова Ю.В. *153*

АНОМАЛИИ ЭЛЕКТРОННОЙ ТЕПЛОЕМКОСТИ ПРИ ФАЗОВОМ ПЕРЕХОДЕ В КИРАЛЬНОМ ФЕРРОМАГНЕТИКЕ MnSi

Черникова М.А., Повзнер А.А., Волков А.Г., Ноговицына Т.А. *156*

КАРТИРОВАНИЕ ОТНОСИТЕЛЬНОЙ ЭНЕРГИИ ГРАНИЦ ЗЕРЕН УЛЬТРАМЕЛКОЗЕРНИСТОЙ МЕДИ НА ОСНОВЕ ДАННЫХ СКАНИРУЮЩЕЙ ТУННЕЛЬНОЙ МИКРОСКОПИИ

Чикунова Н.С., Столбовский А.В., Мурзинова С.А., Фалахутдинов Р.М., Блинов И.В., Истомина А.Ю. *157*

ИССЛЕДОВАНИЕ ИНТЕРКАЛЯЦИОННОЙ СИСТЕМЫ $Fe_{1/3}TiS_2$ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЭВОЛЮЦИОННЫХ АЛГОРИТМОВ И ПЕРВОПРИНЦИПНЫХ РАСЧЁТОВ

Чубарова А.А., Мамонова М.В., Кемпф Л.А. *160*

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СТЕКОЛ И СТЕКЛОКЕРАМИКИ НА ОСНОВЕ $LiGe_2(PO_4)_3$

Давлетчин Е.Д., Першина С.В., Вайнштейн И.А., Власов М.И. *162*

ФОТОСОРБЦИОННЫЕ СВОЙСТВА НАНОРАЗМЕРНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУР G-C_3N_4/TiO_2 ПО ОТНОШЕНИЮ К ИОНАМ ГАЛЛИЯ

Дорошева И.Б., Печищева Н.В., Зайцева П.В., Ремпель А.А. *164*

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ МАГНИТНЫХ И МАГНИТОРЕЗИТИВНЫХ СВОЙСТВ НАНОПРОВОЛОК CO В ТОНКОПЛЕНОЧНОЙ МАТРИЦЕ ОКСИДА АЛЮМИНИЯ

Дрягина А. Е., Горьковенко А. Н., Кулеш Н.А., Васьковский В. О. *166*

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ, ОПИСЫВАЮЩЕЙ КОНВЕКТИВНОЕ ТЕЧЕНИЕ ВЯЗКОЙ НЕСЖИМАЕМОЙ ЖИДКОСТИ В ГОРИЗОНТАЛЬНОМ СЛОЕ

Бурмашева Н.В., Дьячкова А.В., Просвиряков Е.Ю. *168*

ТЕРМИЧЕСКИЙ РОСТ ОБЪЕМНЫХ ДОМЕНОВ, СОЗДАННЫХ ПРИ ПОМОЩИ ФЕМТОСЕКУНДНОГО ЛАЗЕРА В НИОБАТЕ ЛИТИЯ, ЛЕГИРОВАННОГО МАГНИЕМ

Ефимов А.В., Кособоков М.С., Лисьих Б.И., Кузнецов Д.К., Шур В.Я. *170*

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ГЕОМЕТРИЧЕСКОЙ И ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ЭНДОЭДРАЛЬНЫХ ФУЛЛЕРЕНОВ $M@C_{20}$ (M=Li, Na, K)

Эль Занин А. Р., Борознин С. В. *172*

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МОДИФИЦИРОВАННЫХ НИТРОГРУППОЙ БОРОНИТРИДНЫХ НАНОТРУБОК В КАЧЕСТВЕ ЭЛЕМЕНТОВ СЕНСОРНЫХ УСТРОЙСТВ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ МИКРОКОЛИЧЕСТВА ВЕЩЕСТВА

Ерофеев Д.Р., Борознина Н.П., Борознин С.В., Запороцкова И.В. *174*

ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРО- И МАГНИТОТРАНСПОРТА В ТОПОЛОГИЧЕСКОМ ПОЛУМЕТАЛЛЕ $PtSn_4$

Фоминых Б.М., Перевалова А.Н., Наумов С.В., Марченков В.В. *176*

СПЕЦИФИКА РАССЕЯНИЯ УЛЬТРАКОРОТКИХ ИМПУЛЬСОВ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА АЛМАЗАХ С NV-ЦЕНТРАМИ

Герасименко Д.Е., Макаров Д.Н. *178*

ЭВОЛЮЦИЯ АНСАМБЛЯ СФЕРИЧЕСКИХ ЧАСТИЦ В МЕТАСТАБИЛЬНОЙ СРЕДЕ С УЧЕТОМ ИХ СКОРОСТИ РОСТА В НЕСТАЦИОНАРНОМ СОСТОЯНИИ

Глебова А.Е., Корозникова И.Е., Александров Д.В. *180*

ВЛИЯНИЕ СОСТАВОВ ЛЕГКОПЛАВКОЙ ДОБАВКИ НА МАГНИТНЫЕ ГИСТЕРЕЗИСНЫЕ СВОЙСТВА НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СПЛАВОВ Nd-Fe-B ПОСЛЕ ИНФИЛЬТРАЦИИ

Голубятникова А. А., Шалагинов А. Н., Андреев С. В., Волегов А. С. *182*

МАГНИТНЫЕ И ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА, СТРУКТУРА И ТВЕРДОСТЬ ОБРАЗЦОВ ИЗ КОРРОЗИОННО-СТОЙКОЙ СТАЛИ GP1, ИЗГОТОВЛЕННЫХ НА ЛАЗЕРНОМ 3D-ПРИНТЕРЕ

Гордеев Н.В., Сташков А.Н., Щапова Е.А. *184*

ПРОВЕДЕНИЕ ИЗМЕРЕНИЙ МАГНИТНЫХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ ПЕРВОГО РОДА В УСЛОВИЯХ ГИДРОСТАТИЧЕСКОГО ДАВЛЕНИЯ

Говорина В.В., Незнахин Д.С. *186*

ДОМЕННЫЙ МЕХАНИЗМ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОТЕРЬ В КРИСТАЛЛЕ СЕГНЕТОВОЙ СОЛИ

Гупалова А.Е., Попов И.И. *188*

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И ФИЗИКОХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СПЛАВОВ Al-Cu С ПОМОЩЬЮ МЕЖЧАСТИЧНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ НА ОСНОВЕ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

Хазиева Е.О., Рыльцев Р.Е., Щелкачев Н.М., Типеев А.О. *190*

EVOLUTION OF THE MAGNETIC PROPERTIES OF TWO-DIMENSIONAL Fe_3GeTe_2 UNDER STRAIN

Iakovlev I.A., Pushkarev G.V., Mazurenko V.V. *192*

ИССЛЕДОВАНИЕ ДОЗОВОЙ ЗАВИСИМОСТИ ДЕТЕКТОРОВ НА ОСНОВЕ Al_2O_3

Игумнова Д.И., Смольникова Е.Н., Войнов В.С., Мильман И.И. *193*

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ГРАФИТОПОДОБНОГО НИТРИДА УГЛЕРОДА С УЧЕТОМ ВАРЬИРОВАНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ

Ильяшенко И.Н., Мартемьянов Н.А., Ищенко А.В., Звонарев С.В., Вайнштейн И.А. *195*

СРАВНЕНИЕ СИСТЕМ РЕГИСТРАЦИИ РЕНТГЕНОВСКИХ СПЕКТРОВ И ИЗОБРАЖЕНИЙ В РАЗЛИЧНОЙ КОМБИНАЦИИ ПАРЫ «ДЕТЕКТОР–КАМЕРА»

Кантур И.Э, Ярмошенко Ю.М, Долгих В.Е., Кузнецова Т.В. *197*

ДЕКОРИРОВАНИЕ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ СВЕРХГИДРОФОБНЫХ ПОКРЫТИЙ

Капустин С. Н. *200*

ОСОБЕННОСТИ КИНЕТИКИ ТЕРМОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ КЕРАМИК ZrO_2:Ce, СИНТЕЗИРОВАННЫХ ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВЫМ МЕТОДОМ

Касаткина Я.П., Никифоров С.В., Лисицын В. М., Голковский М.Г., Даулетбекова А… *202*

ИЗУЧЕНИЕ НЕАДДИТИВНОСТИ ПРОЦЕССОВ КАВИТАЦИОННОГО И ЭЛЕКТРОКОРРОЗИОННОГО РАЗРУШЕНИЯ ПОВЕРХНОСТИ МЕТАЛЛОВ, ИЗГОТОВЛЕННЫХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ 3D-ПЕЧАТИ

Керимов Р.С., Капустин С.Н. *204*

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ДЕФЕКТОВ СТРУКТУРЫ НА НЕРАВНОВЕСНОЕ КРИТИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ АНИЗОТРОПНОЙ МОДЕЛИ ГЕЙЗЕНБЕРГА

Хитринцева В.В., Прудников В.В. *206*

ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ФОРМИРОВАНИЯ ДОМЕННОЙ СТРУКТУРЫ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ ИОННЫМ ПУЧКОМ МОНОДОМЕННЫХ ОБЛАСТЕЙ В НИОБАТЕ БАРИЯ-СТРОНЦИЯ

Холоденко М.Д., Пашнина Е.А., Ахматханов А.Р., Небогатиков М.С., Шихова В.А., Слаутина А.С., Чезганов Д.С. *208*

ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ ИОНОВ Pr^{3+} И ЦЕНТРЫ ЗАХВАТА НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В $Sr_3Lu_2Ge_3O_{12}$ И $Ba_9Lu_2Si_6O_{24}$

Киселев С.А., Пустоваров В.А., Ши Ч. *211*

ВЛИЯНИЕ ДИСУЛЬФИДА ТИТАНА НА СВЕРХПРОВОДЯЩИЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ТЕЛЛУРИДА ЖЕЛЕЗА

Кислов Е., Селезнева Н.В., Баранов Н.В. *213*

МАГНИТНЫЕ И СТРУКТУРНЫЕ СВОЙСТВА В $Fe_{7-X}M_XSe_8$ (M=Ti, Cr, Ni)

Горбов Л.Е., Ключарев М.Д., Селезнева Н.В., Баранов Н.В. *215*

МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА И МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ СОЕДИНЕНИЯ $Ho(Me_{0.84}Fe_{0.16})_2$, ГДЕ Me = Co, Ni

Аникин М.С., Тарасов Е.Н., Князев М.И., Незнахин Д.С., Зинин А.В. *217*

ФОТОСТИМУЛИРОВАННАЯ ЭЛЕКТРОННАЯ ЭМИССИЯ В ПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЯХ ДИОКСИДОВ КРЕМНИЯ И ГЕРМАНИЯ

Бунтов Е.А., Кочаков Я.А., Зацепин А.Ф. *220*

ВЛИЯНИЕ СТЕПЕНИ ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИИ НА ПРОВОДИМОСТЬ УНТ

Колпаков П.А., Капустин С.Н. *222*

ЭФФЕКТ ОБМЕННОГО СМЕЩЕНИЯ В ФЕРРИМАГНЕТИКЕ Fe_2CrSe_4

Комарова В.А., Мозговых С.Н., Шерокалова Е.М., Селезнева Н.В., Баранов Н.В. *224*

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И ДЕФЕКТОВ ГРАФЕНА ПРИ ПЕРЕНОСЕ НА ПОВЕРХНОСТИ РАЗЛИЧНОГО РЕЛЬЕФА

Комлина С.В. *226*

ПОДХОДЫ К ПРОЕКТИРОВАНИЮ МАГНИТНЫХ СИСТЕМ, ИЗГОТАВЛИВАЕМЫМ МЕТОДОМ СЕЛЕКТИВНОГО ЛАЗЕРНОГО ПЛАВЛЕНИЯ

Корчигин К.А., Волегов А.С. *228*

ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННОГО ТРАНСПОРТА И МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ СПЛАВА Mn_3Al В ЛИТОМ И БЫСТРОЗАКАЛЕННОМ СОСТОЯНИИ

Коренистов П.С., Ирхин В.Ю., Семянникова А.А., Марченкова Е.Б., Марченков В. В. ..*230*

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЧИСЛА НЕНУЛЕВЫХ ОБМЕННЫХ ПАРАМЕТРОВ МОДЕЛИ НА ОСНОВЕ ЕЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ НАБЛЮДАЕМЫХ
Козлов Е. И., Яковлев И. А., Мазуренко В. В. 232

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКАЯ СТАБИЛЬНОСТЬ СИСТЕМЫ GaFeAs
Крюков Р.Н., Кудрин А.В., Зубков С.Ю. 234

ПОВЫШЕНИЕ СХОДИМОСТИ МЕТОДА МОНТЕ-КАРЛО ДЛЯ МОДЕЛИ ИЗИНГА ПРИ ПОМОЩИ PEDD
Кукушкин Д.Е., Кашин И.В. 236

ПРИМЕНЕНИЕ ПОЗИТРОННОЙ АННИГИЛЯЦИННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ДЛЯ АНАЛИЗА ДЕФЕКТОВ В СИНТЕТИЧЕСКИХ АЛМАЗНЫХ ПЛАСТИНАХ
Кузив И.В. 238

ДИАГНОСТИКА ТЕПЛОПРОВОДЯЩИХ СВОЙСТВ ПЕРКОЛЯЦИОННЫХ СЕТЕЙ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК С РАЗЛИЧНЫМИ ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИЯМИ
Логинова А.С., Капустин С.Н. 240

КРОССОВЕР МАГНИТНОГО И ЭЛЕКТРОННОГО ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В ФЕРРОМАГНИТНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ
Лопатко Э.И., Повзнер А.А., Волков А.Г., Зайцева Н.А., Ноговицына Т.А. 242

АНАЛИЗ ИНТЕГРО-ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ МОДЕЛИ ПРОЦЕССА КРИСТАЛЛИЗАЦИИ С УЧЕТОМ ПОДАЧИ ПРИМЕСИ, РОСТА ЧАСТИЦ И УДАЛЕНИЯ КРИСТАЛЛОВ ПРОДУКТА
Маковеева Е.В. 244

ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА ТЕРМОПОЛИМЕРИЗОВАННЫХ СТРУКТУР g-C_3N_4
Мартемьянов Н.А., Ильяшенко И.Н., Ищенко А.В., Вайнштейн И.А. 246

РАМАНОВСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ МОДИФИЦИРОВАННОГО CaF_2
Маслова С.А., Корх Ю.В., Кузнецова Т.В. 248

ОЦЕНКА МЕХАНИЧЕСКИХ НАПРЯЖЕНИЙ В СТАЛЬНОЙ ПЛАСТИНЕ ПРИ ИЗГИБЕ ПО МАГНИТНЫМ ПАРАМЕТРАМ
Матосян А.М., Сташков А.Н., Щапова Е.А. 250

MODELING THE FREQUENCY DEPENDENCE OF THE MAGNETOIMPEDANCE EFFECT OF AMORPHOUS RIBBONS BY THE FINITE ELEMENT METHOD
Pasynkova A.A., Matveeva M.S., Kurlyandskaya G.V. 252

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ ОТЖИГА НА ФАЗОВЫЙ СОСТАВ ТОНКИХ ПЛЁНОК A-FE2O3

Меренцова К.А., Изюров В. В., Артемьев М.С., Десятников И.А., Дубинин С.С., Носов А.П. *254*

ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И СТРУКТУРА НЕСТЕХИОМЕТРИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ $(Fe,Ti)S_{1.8}$

Мозговых С.Н., Шерокалова Е.М., Баранов Н.В., Селезнева Н.В. *256*

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОЧАСТИЦ CeO_2 И CeO_2:RE

Мышкина А.В., Пустоваров В.А, Жидков И.С., Пронина М.О. *258*

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ МАГНИТОТРАНСПОРТНЫХ СВОЙСТВ СВЕРХРЕШЕТОК НА ОСНОВЕ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Найданов И. А., Захаров А. А., Миляев М. А., Проглядо В. В. *260*

ЭВОЛЮЦИЯ ПОЛИДИСПЕРСНОГО АНСАМБЛЯ ЧАСТИЦ НА ПРОМЕЖУТОЧНОЙ СТАДИИ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА

Никишина М.А., Александров Д.В. *262*

КОМПЬЮТЕРНАЯ МОДЕЛЬ МАГНИТОРЕЗИСТИВНОГО ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЯ В ПРОГРАММНОЙ СРЕДЕ COMSOL MULTIPHYSICS

Низаев А.Н., Ювченко А.А., Васьковский В.О. *264*

ЧИСЛЕННЫЙ РАСЧЕТ ФАЗОВЫХ ДИАГРАММ СИСТЕМЫ ЗАРЯЖЕННЫХ СПИН-ТРИПЛЕТНЫХ БОЗОНОВ КЛАССИЧЕСКИМ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

Нужин С.В., Улитко В.А., Панов Ю.Д., Москвин А.С. *267*

РЕЛАКСАЦИЯ СИСТЕМЫ ЯН-ТЕЛЛЕРОВСКИХ КОМПЛЕКСОВ В КРИСТАЛЛЕ CdF_2:Cr

Сарычев М.Н., Офицерова Н.Ю., Жевстовских И.В., Егранов А.В., Гудков В.В. *269*

ИМПУЛЬСНАЯ КАТОДОЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОРОШКООБРАЗНОГО ОКСИНИТРИДА АЛЮМИНИЯ AlON:V

Пастухов Д.А., Ищенко А. В., Скворцова Л.Г., Ахмадуллина Н.С. *271*

СИНТЕЗ, ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРЫ, ЭЛЕКТРО- И МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЯ МОНО- И ПОЛИКРИСТАЛЛА $MnBi_2Te_4$

Перевалова А.Н., Фоминых Б.М., Наумов С.В., Марченкова Е.Б., Марченков В.В. *273*

ТЕМПЕРАТУРНАЯ СТАБИЛЬНОСТЬ КВАНТОВЫХ ПРОВОДНИКОВ В НАНОТУБУЛЯРНОМ ДИОКСИДЕ ЦИРКОНИЯ

Петренёв И.А., Вохминцев А.С., Мартемьянов Н.А., Камалов Р.В., Вайнштейн И.А. ... *275*

ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ СИНТЕЗА НА ХАРАКТЕРИСТИКИ РАДИАЦИОННО-ИНДУЦИРОВАННОГО СИГНАЛА ЭПР ИСКУССТВЕННОГО ГИДРОКСИАПАТИТА
Подшивалов А.П., Байтимиров Д.Р., Конев С.Ф., Иванов Д.В., Слесарев Г.П. 278

МАГНИТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДВУХСЛОЙНЫХ КОМПОЗИТОВ MZF − PZT/EPOXY И MZF − PZT
Пресняков А.Л. 281

ТЕРМОЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ Ga_2O_3 , ОБЛУЧЕННОГО ВЫСОКОДОЗНЫМ ИМПУЛЬСНЫМ ЭЛЕКТРОННЫМ ПУЧКОМ
Прытков Д.И., Никифоров С.В., Лисицын В.М., Голковский М.Г. 283

NATURE OF INTERLAYER BONDS IN TWO-DIMENSIONAL DITELURIDES
Pushkarev G.V., Mazurenko V. G., Mazurenko V. V., Bukhvalov D. V. 285

ВЛИЯНИЕ ПРЕКУРСОРА ИОНОВ КАДМИЯ НА СТАБИЛЬНОСТЬ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОЧАСТИЦ СУЛЬФИДА КАДМИЯ В ВОДНОМ РАСТВОРЕ
Путилова В. Д., Попов И.Д., Кузнецова Ю.В. 287

ИЗМЕНЕНИЕ ФОРМЫ КОЛЛЛОИДНЫХ НАНОЧАСТИЦ, СОЗДАННЫХ ЛАЗЕРНОЙ АБЛЯЦИЕЙ ЦИНКА В ВОДЕ
Рахматова Р.Р., Пряхина В.И. 289

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ АМОРФНОЙ ФАЗЫ В МНОГОФАЗНОМ ОБРАЗЦЕ ПО ДАННЫМ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКТОМЕТРИИ
Романов Р. Р., Денисова О. В., Оштрах М. И. 291

НЕЙТРОНОГРАФИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ОБРАЗЦА $LiNi_{0.25}Co_{0.75}PO_4$
Ромашко П.Е., Сёмкин М.А., Дюжева-Мальцева Е.В., Глазков В.П. 293

ВЛИЯНИЕ КОБАЛЬТА НА ТЕРМИЧЕСКУЮ СТАБИЛЬНОСТЬ И СТЕКЛООБРАЗУЮЩУЮ СПОСОБНОСТЬ АМОРФНЫХ СПЛАВОВ Al-Ni-Co-РЗМ
Русанов Б.А., Сидоров В.Е. 296

ИССЛЕДОВАНИЯ СТРУКТУРНЫХ ИЗМЕНЕНИЙ В ГИДРИРОВАННЫХ СВЕРХРЕШЕТКАХ Fe/Gd МЕТОДАМИ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКЦИИ И РЕФЛЕКТОМЕТРИИ
Рыжова А.А., Девятериков Д.И. 298

ОБМЕННОЕ УСИЛЕНИЕ G-ФАКТОРА ЭЛЕКТРОНОВ В МЕТАМОРФНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ InGaAs/InAlAs С ВЫСОКИМ СОДЕРЖАНИЕМ INAS
Сандаков Н.С., Гудина С.В., Неверов В.Н., Боголюбский А.С., Туруткин К.В., Якунин М.В., Васильевский И.С., Виниченко А.Н. 300

ВЛИЯНИЕ ЗАТУХАНИЯ НА КАУСТИКУ МАГНИТОУПРУГИХ ВОЛН В ФЕРРОМАГНЕТИКАХ
Савченко С.П., Бахарев С.М., Борич М.А. *302*

НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЕ ПОСЛЕСВЕЧЕНИЕ НАНОКРИСТАЛЛОВ InP/ZnS
Савченко С.С., Вохминцев А.С., Вайнштейн И.А. *304*

ОЦЕНКА УПРУГИХ МЕХАНИЧЕСКИХ НАПРЯЖЕНИЙ В ФЕРРОМАГНЕТИКАХ С РАЗНЫМИ ЗНАКАМИ МАГНИТОСТРИКЦИИ
Щапова Е.А., Сташков А.Н. *306*

ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ МАГНИТНОГО ГИСТЕРЕЗИСА СЛОЁВ FE В ПЛЁНОЧНЫХ СТРУКТУРАХ НА ОСНОВЕ АНТИФЕРРОМАГНЕТИКА $Cr_{80}Mn_{20}$
Северова С.В., Фещенко А.А., Горьковенко А.Н., Васьковский В.О. *308*

ПРИМЕНЕНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОГО РАЗРЕШЕНИЯ ФУНКЦИЙ ГРИНА ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ КОЛЛЕКТИВНЫХ СПИНОВЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ В ПРОВОДЯЩИХ МАТЕРИАЛАХ
Шагивалеева С.Р., Кашин И.В. *310*

ВЛИЯНИЕ НАПРАВЛЕНИЯ ДВИЖЕНИЯ ЛАЗЕРА НА МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ОБРАЗЦОВ, ПОЛУЧЕННЫХ SLS МЕТОДОМ
Шаймарданова Л.Г., Русинова Т.Д., Волегов А.С., Мальцева В.Е., Степанова Е.А. *311*

МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА БЫСТРОЗАКАЛЕННЫХ СПЛАВОВ Sm-Fe-V
Шалагинов А.Н., Голубятникова А.А., Андреев С.В., Волегов А.С. *314*

ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ДИАГРАММ СИСТЕМЫ $AgBr_{0.7}I_{0.3}$-AgCl
Шатунова Д.В. *316*

ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ СИНТЕЗА НА МИКРОКРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ИСКУССТВЕННЫХ ГИДРОКСИАПАТИТОВ (ГАП)
Щанов В.А., Чукин А.В. *318*

ВОЗМОЖНОСТЬ ОПРЕДЕЛНИЯ ОБЩЕГО СОДЕРЖАНИЯ ХИМИЧЕСКОГО ЭЛЕМЕНТА В ПРОБЕ ПО ДАННЫМ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФФРАКЦИИ
Щепин К. В., Чукин А. В. *320*

СПЕКТРАЛЬНО-РАЗРЕШЕННАЯ ТЕРМОЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ НАНОТРУБОК ДИОКСИДА ГАФНИЯ В ДИАПАЗОНЕ LNT – 623 K
Шилов А.О., Медведев Т.Е., Морозов А.Р., Камалов Р.В., Вохминцев А.С., Вайнштейн И.А. *322*

МИГРАЦИЯ ОДИНОЧНОГО ПРОТОНА ПО ПОВЕРХНОСТИ ДВУМЕРНОГО СЛОЯ BCN

Шкодин А.В., Борознина Е.В. *324*

ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ И ДОЗИМЕТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КЕРАМИК ОКСИДА МАГНИЯ С ПРИМЕСЬЮ ЦЕРИЯ

Шмелева А.Е., Штанг Т.В., Никифоров С.В., Лисицын В.М. *326*

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ МНОЖЕСТВА ЗАСТОЙНЫХ ТОЧЕК В ЗАВИСИМОСТИ ОТ УГЛОВОЙ СКОРОСТИ ВРАЩЕНИЯ ЖИДКОСТИ НА ОДНОЙ ИЗ ГРАНИЦ

Просвиряков Е.Ю., Соколов А.С. *328*

МИКРОМАГНИТНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПЕРЕМАГНИЧИВАНИЯ В ТОНКИХ АНТИФЕРРОМАГНИТНЫХ ПЛЁНКАХ

Солнцев С. Д., Москалев М. Е. *330*

ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫЕ СПЛАВЫ CoCrFeNi: СТРУКТУРА И ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

Стерхов Е.В., Быков В.А., Сипатов И.С. *332*

САМОДИФФУЗИЯ В ГРАНИЦАХ ЗЕРЕН В НАНОКРИСТАЛЛЕ НИКЕЛЯ

Ступак М.Е., Уразалиев М.Г., Попов В.В. *334*

ЭФФЕКТ МАГНИТООТРАЖЕНИЯ СВЕТА И ЕГО СВЯЗЬ С МАГНИТОСТРИКЦИЕЙ В ФЕРРИТ-ШПИНЕЛИ $MnFe_2O_4$

Суржиков Е.А., Сухоруков Ю.П., Телегин А.В. *336*

ДИНАМИКА РЕШЕТКИ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МАГНИЙ-АЛЮМИНИЕВОЙ ШПИНЕЛИ С НЕУПОРЯДОЧЕННЫМ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ КАТИОНОВ ПО ПОЗИЦИЯМ

Сушанек Л.Я., Щапова Ю.В., Киряков А.Н., Зацепин А.Ф. *338*

ИССЛЕДОВАНИЕ СТАБИЛЬНОСТИ И МЕТОДОВ КОНТРОЛЯ СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЙ ПОВЕРХНОСТНЫХ НАНОСИСТЕМ В РЕЖИМЕ ПЕРЕДАЮЩИХ И ЛОГИЧЕСКИХ УСТРОЙСТВ

Кашин И.В., Сырников Е.В. *340*

GADOLINIUM OXIDE SINGLE CRYSTALS: OPTICAL PROPERTIES AND RADIATION RESISTANCE

Tavrunov D.A., Nikolaev R.E., Tarasenko M.S., Naumov N.G., Pustovarov V.A. *342*

THE ROLE OF FLUID VELOCITY ON THE SHAPE OF DENDRITIC TIPS
Alexandrov D.V., Kao A., Galenko P.K., Lippmann S., Starodumov I.O., Demange G., Toropova L.V. *344*

ВЛИЯНИЕ ОТЖИГА НА МАГНИТОРЕЗЕСТИВНЫЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИТОВ $(Co_{47}Fe_{42}Zr_{11})_X(MgF_2)_{100-X}$
Трегубова Т.В., Стогней О.В., Габриельс К.С., Макагонов В.А.1, Фошин В.А., Трегубов И.М. *346*

ВЛИЯНИЕ КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ЭФФЕКТОВ НА ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА $CuCo_2S_4$: РАСЧЕТЫ В РАМКАХ DFT+DFMT
Скорняков С.Л., Трифонов И,О. *348*

СРАВНИТЕЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ РАСТВОРОВ, ТОНКИХ ПЛЕНОК И ПОРОШКОВ НА ОСНОВЕ БЕНЗОТИЕНОАЦЕНОВ
Трофимова К.Е., Устюжанина Ю.Э., Ищенко А.В., Иргашев Р.А., Вайнштейн И.А. *351*

ВЛИЯНИЕ СПИНОВОГО СОСТОЯНИЯ ИОНОВ КОБАЛЬТА НА ПЕРЕХОД МЕТАЛЛ- ИЗОЛЯТОР В СЛОИСТЫХ КОБАЛЬТИТАХ
Уткин Н.А., Солин Н.И., Наумов С.В. *353*

УСИЛЕНИЕ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ УГЛЕРОДНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК ПРИ ПОМОЩИ ЯВЛЕНИЯ ПОВЕРХНОСТНОГО ПЛАЗМОННОГО РЕЗОНАНСА
Вагапов А. Ш., Киряков А. Н., Зацепин А. Ф. *355*

МЕТАМАГНЕТИЗМ КОЛЛЕКТИВИЗИРОВАННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ В МОДЕЛИ ХАББАРДА ДЛЯ ГЦК РЕШЕТКИ, ИНДУЦИРОВАННЫЙ ПЛАТО ВАН ХОВА
Василевский Ф.А., Игошев П.А. *357*

СРАВНИТЕЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МАГНИТНЫХ НАНОПРОВОЛОК В ТОНКОПЛЕНОЧНОМ СЛОЕ ОКСИДА АЛЮМИНИЯ ПОЛУЧЕННЫХ В РАЗНЫХ РЕЖИМАХ ЭЛЕКТРООСАЖДЕНИЯ
Верясова А.А., Дрягина А.Е., Горьковенко А.Н., Кулеш Н.А., Васьковский В.О. *360*

ИНЖЕКЦИЯ ЧИСТО СПИНОВОГО ТОКА В ГЕЛИМАГНЕТИК
Ясюлевич И.А., Бебенин Н.Г., Устинов В.В. *362*

КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ В ОБРАЗЦАХ ТОНКИХ ПЛЕНОК Sb2Te ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ЗНАЧЕНИЯХ ВРЕМЕНИ И ТЕМПЕРАТУРЫ ОТЖИГА
Юшков А. А. *364*

РАСЧЕТ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ И ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОВЕРХНОСТИ ЦИНКОСОДЕРЖАЩИХ ЧАСТИЦ В ПЛЕНКАХ ДИОКСИДА КРЕМНИЯ

Забокрицкая Е.С., Бунтов Е.А., Кащенко Н.М., Зацепин А.Ф *366*

АНАЛИЗ БЛИЖНЕГО ПОРЯДКА В $LiGe_2(PO_4)_3$ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ФУНКЦИЙ ПАРНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

Зыков К.Ю., Балякин И.А., Першина С.В., Власов М.И., Ремпель А.А *368*

СЕКЦИЯ 3. ПРИБОРОСТРОЕНИЕ И РОБОТОТЕХНИКА

РАЗРАБОТКА АВТОМАТИЗИРОВАННОЙ СИСТЕМЫ УПРАВЛЕНИЯ ПРОЦЕССОМ ОТБЕЛКИ МАСЛА В ПО SIEMENS SIMATIC STEP 7

Айсин А.М., Вохминцев А.С., Авдеев Н.О. *371*

ТЕНЗОМОДУЛЬ ДАТЧИКА ДАВЛЕНИЯ С ПОВЫШЕННОЙ МЕХАНИЧЕСКОЙ ПРОЧНОСТЬЮ И ВСТРОЕННЫМ ДАТЧИКОМ ТЕМПЕРАТУРЫ

Басов М.В. *374*

ОПТИМАЛЬНОЕ УПРАВЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОМЕХАНИЧЕСКОЙ СИСТЕМОЙ ДВУХЗВЕННОГО МАНИПУЛЯТОРА

Чупин И.А. *377*

РАЗРАБОТКА ВИРТУАЛЬНОГО ПРИБОРА ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ МЕМРИСТИВНЫХ СТРУКТУР В ИМПУЛЬСНОМ РЕЖИМЕ

Федоров Д.Д., Петренёв И.А., Вохминцев А.С., Вайнштейн И.А. *378*

РАЗРАБОТКА АППАРАТНО-ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ ВЕЩЕСТВ ПРИ ОХЛАЖДЕНИИ

Гашимова В.Р., Тестов Д.С, Моржухина С.В., Моржухин А.М. *381*

ВОЗМОЖНОСТЬ НЕРАЗРУШАЮЩЕГО КОНТРОЛЯ ФАЗОВОГО СОСТАВА АУСТЕНИТНЫХ ХРОМОНИКЕЛЕВЫХ СТАЛЕЙ ПО ВЕЛИЧИНЕ УДЕЛЬНОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО СОПРОТИВЛЕНИЯ

Кочнев А.В., Огнева М.С., Ригмант М.Б., Корх М.К. *383*

QUADROCOPTER DYNAMICS MODEL

Kononov M.N., Parygina Yu.V., Grobova S.K. *385*

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОВЫХ ПРОЦЕССОВ В СВЕРХЗВУКОВОМ ПЛАЗМОТРОНЕ

Коренева Е.А., Барашев Н.Р., Куклин И.Э., Савельев Д.Д. *387*

РАЗРАБОТКА ПРИНЦИПИАЛЬНОЙ ОПТИЧЕСКОЙ СХЕМЫ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ВНУТРЕННИХ НАПРЯЖЕНИЙ В КОМПОЗИЦИОННОМ МАТЕРИАЛЕ «МЕТАЛЛ-СТЕКЛО-КЕРАМИКА»

Костров В.С., Шардаков Н.Т., Бушмакин И.М., Решетов В.А. *389*

ПРОГРАММНО-АППАРАТНЫЙ МОДУЛЬ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ СИНАПТИЧЕСКОЙ ПЛАСТИЧНОСТИ МЕМРИСТИВНЫХ СТРУКТУР

Литвинов А.Е., Моисейкин Е.В., Устьянцев Ю.Г., Вохминцев А.С., Гулин А.А. *391*

РАЗРАБОТКА КОНСТРУКЦИИ 2Х-ОСЕВОГО КООРДИНАТНОГО СТОЛА ДЛЯ ПЕРФОРАЦИИ ПЕЧАТНЫХ ПЛАТ

Лягаев А.П., Огородникова О.М. *393*

РАЗРАБОТКА 3D-ПРИНТЕРА ДЛЯ ПЕЧАТИ ПЕРСОНАЛИЗИРОВАННЫХ ПОВЯЗОК

Лыкова М. В., Музыка А. Л. *395*

РАЗРАБОТКА МЕТОДИКИ КОРРЕКЦИИ СНИМКОВ ЭЛЕКТРОДНЫХ ПЯТЕН, ПОЛУЧЕННЫХ ИНТЕРФЕРЕНЦИОННЫМ МИКРОСКОПОМ NEWVIEW 5010

Максимов А.Д., Азаркевич Е.И., Бекетов И.В., Колеух Д.С. *398*

СИСТЕМА СБОРА ДАННЫХ ТЕРМОПАРНОГО КАЛОРИМЕТРА

Мамонов А.А., Подковыров В.Л., Ярошевская А.Д., Гуторов К.М., Короленок Е.А., Чернышев В.С. *400*

ИЗГОТОВЛЕНИЕ ИНТЕГРИРУЮЩЕЙ СФЕРЫ ДЛЯ ЛЮМИНЕСЦЕНТНОГО СПЕКТРОМЕТРА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ 3D-ПРИНТЕРА

Матвеев А.А., Трофимова К.Е, Ищенко А.В., Вайнштейн И.А. *403*

РАЗРАБОТКА НАМАГНИЧИВАЮЩЕЙ СИСТЕМЫ С ФЕРРОМАГНИТНЫМИ КОЛЕСАМИ ДЛЯ МАГНИТНЫХ СКАНЕРОВ-ДЕФЕКТОСКОПОВ БУРИЛЬНЫХ ТРУБ

Михайлов Л.В., Михайлов А.В., Никитин А.В., Гобов Ю.Л., Костин В.Н., Смородинский Я.Г. *405*

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОБЛАСТИ ПРИМЕНЕНИЯ МЕТОДИКИ РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ ГЕОМЕТРИЧЕСКОЙ ЗАДАЧИ МАГНИТОСТАТИКИ ДЛЯ ПОВЕРХНОСТНЫХ ДЕФЕКТОВ ФЕРРОМАГНЕТИКА

Никитин А.В., Михайлов Л.В., Михайлов А.В., Гобов Ю.Л., Костин В.Н., Смородинский Я.Г. *407*

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ДИСПЕРСИИ ПИКОСЕКУНДНЫХ ИМПУЛЬСОВ НА МИКРОПОЛОСКОВЫХ ЛИНИЯХ ПЕРЕДАЧИ

Патраков В.Е. *409*

МОДЕРНИЗАЦИЯ ПРИЕМНИКА ИЗЛУЧЕНИЯ ПРИЗМЕННОГО СПЕКТРОГРАФА ОПТИЧЕСКОГО СПЕКТРА
Попов А.А., Костюнин А.В., Кокорин А.Ф. *412*

СОЗДАНИЕ ПЛАЗМОТРОНА ДЛЯ НАПЫЛЕНИЯ ВНУТРЕННИХ ПОВЕРХНОСТЕЙ ОТНОСИТЕЛЬНО МАЛОГО ДИАМЕТРА
Савельев Д.Д., Барашев Н.Р. *414*

ПОРТАТИВНЫЙ ГЕНЕРАТОР СИНХРОНИЗИРУЮЩИХ ИМПУЛЬСОВ
Смольникова Е.Н., Осипенко Е.А. *416*

УНИВЕРСАЛЬНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ ЦИФРОВОГО ГЕНЕРИРОВАНИЯ И АНАЛИЗА МАГНИТНОГО ПОЛЯ С ПРОИЗВОЛЬНОЙ ВРЕМЕННОЙ ЗАВИСИМОСТЬЮ
Унгвицкий Г.И., Костин В.Н. *418*

ЭКСРЕСС-АНАЛИЗ СОСТАВА МОЛОЧНОЙ ПРОДУКЦИИ С ПРИМЕНЕНИЕМ МЕТОДОВ ИК-СПЕКТРОСКОПИИ
Заневская М. Ю., Мазинг М.С., Чередникова А.А., Зайцева А.Ю. *421*

СЕКЦИЯ 4. ХИМИЧЕСКИЕ ТЕХНОЛОГИИ

ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ СИНТЕЗА МОДИФИЦИРОВАННОГО ОКСИДА АЛЮМИНИЯ НА ЕГО ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА
Акулов А.В., Солодовникова П.А. *425*

SYNTHESIS OF MODIFIED PECTIN AND FURTHER DEVELOPMENT TO FORM MICRO-GEL PARTICLES USING 1,4-BIS(3-AMINOPROPYL)PIPERAZINE
Almudhhi I.YAMA, Kuzmin V.I, Mironov M.A *427*

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ПЛЕНОК PbS(Y) И PbS(Y,I)
Басалаев И.Д., Селянина А. Д., Маскаева Л.Н., Марков В.Ф. *429*

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЗНАЧЕНИЯ РН НА РАЗМЕР И ФОРМУ ЧАСТИЦ ЦИРКОНАТА ГАДОЛИНИЯ В ХОДЕ КОНТРОЛИРУЕМОГО ДВУХСТРУЙНОГО ОСАЖДЕНИЯ
Баженова Е.С., Сазонов И.М., Буйначев С.В. *431*

РАЗРАБОТКА МЕТОДА ОПРЕДЕЛЕНИЯ Sr-90 В ПРИРОДНЫХ ВОДАХ С НИЗКИМ ПРЕДЕЛОМ ОБНАРУЖЕНИЯ
Белоконова Н.В., Воронина А.В. *433*

ОПРЕДЕЛЕНИЕ БИОМАРКЕРОВ МЕТОДОМ «ОТПЕЧАТКОВ ПАЛЬЦЕВ» В ВУЛКАНИЧЕСКОЙ НЕФТИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ГХ-МС

Белоносова В.А., Данилов Д.А., Киселева Д.В. *435*

ПРИМЕНЕНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЛЯ ОПТИМИЗАЦИИ ИСП-АЭС ОПРЕДЕЛЕНИЯ ГАЛЛИЯ В МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛАХ

Белозерова А.А., Майорова А.В., Бардина М.Н., Холманских И.А. *437*

ВЛИЯНИЕ ЛЕГИРУЮЩЕЙ ПРИМЕСИ ХРОМА НА МОРФОЛОГИЮ ХИМИЧЕСКИ ОСАЖДЕННЫХ ПЛЕНОК PbS

Бельцева А.В., Поздин А.В., Маскаева Л.Н. *439*

ЭЛЕКТРОДНЫЕ ПОТЕНЦИАЛЫ СЕРЕБРА В ЭВТЕКТИЧЕСКОМ РАСПЛАВЕ NaCl–KCl

Бессонова Д.А., Иванов А.Б., Волкович В.А. *441*

OPTIMISATION OF EXTRACTION METHODS OF CHLORELLA GROWTH FACTOR FROM CHLORELLA VULGARIS AS A POTENTIAL NANOPARTICLE MATERIAL

Bulya Torkwase Emmanuella, Mironov M.A *443*

СИНТЕЗ ЦИРКОНАТА ГАДОЛИНИЯ МЕТОДОМ КОНТРОЛИРУЕМОГО ДВУХСТРУЙНОГО ОСАЖДЕНИЯ ПРИ ПОСТОЯННОМ ЗНАЧЕНИИ PH

Буйначев С.В., Баженова Е.С., Сазонов И.М. *445*

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА ЦИРКОНА МЕТОДОМ РЕНТГЕНОФЛУОРЕСЦЕНТНОГО АНАЛИЗА

Чекунова А.А., Абрамов А.В., Шаденко И.П. *447*

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ДОБАВКИ ИТТРИЯ НА ПРОЦЕСС ОСАЖДЕНИЯ ГИДРОКСИДА ЦИРКОНИЯ В ХОДЕ КОНТРОЛИРУЕМОГО ДВУХСТРУЙНОГО ОСАЖДЕНИЯ

Домашенков М.А., Буйначев С.В., Машковцев М.А. *449*

СЕНСОРНЫЕ СВОЙСТВА ТОНКИХ ПЛЁНОК В СИСТЕМЕ CdS - PbS

Селянина А.Д., Дёмина Д.А., Маскаева Л.Н., Марков В.Ф. *452*

ИССЛЕДОВАНИЕ СОРБЦИОННЫХ СВОЙСТВ BI-207 НА ТОНКОСЛОЙНЫХ НЕОРГАНИЧЕСКИХ СОРБЕНТАХ НА ОСНОВЕ СУЛЬФИДА КАДМИЯ

Ермолаева В.Д., Семенищев В.С. *454*

РАЗРАБОТКА МЕТОДИКИ РАЗЛОЖЕНИЯ ЗОЛОТОНЕСУЩИХ РУД С СУЛЬФИДНО-УГЛЕРОДНОЙ МАТРИЦЕЙ

Федорова В.П., Игошева В.С., Упорова Н.С., Васильева Н.Л., Киселева Д.В. *456*

ОПРЕДЕЛЕНИЕ АЛЬФА-ИЗЛУЧАЮЩИХ РАДИОНУКЛИДОВ В ОБРАЗЦАХ ТВЕРДЫХ РАДИОАКТИВНЫХ ОТХОДОВ АО ЧМЗ

Фомин А.В., Семенищев В.С., Скрипченко С.Ю., Титова С.М., Наливайко К.А. *458*

ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ PF ОСАЖДЕНИЯ НА СВОЙСТВА ЧАСТИЦ ФТОРИДА ЦЕРИЯ

Клеена Л.А., Гасимова А.Ф., Дедюхин А.С., Щетинский А.В. *460*

РАСЧЕТ РЕАКТОРА ПАРОВОЙ КОНВЕРСИИ МЕТАНА ПО ОДНОМЕРНОЙ КИНЕТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

Голдобин Т.А., Никитин А.Д., Рыжков А.Ф. *462*

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ СПОСОБОВ НАНЕСЕНИЯ СТЕКЛОГЕРМЕТИКОВ ПРИ СБОРКЕ ТОТЭ

Никонорова В.А., Кучугуров А.В., Голоднова А.И., Горшков М.Ю., Ерпалов М.В. *464*

КОРРОЗИОННОЕ ПОВЕДЕНИЕ ХАСТЕЛЛОЯ В РАСПЛАВАХ

Гордеева Ю.Ф., Филатов Е.С. *467*

РАЗРАБОТКА МЕТОДИК АНАЛИЗА ТОПЛИВНОЙ КОМПОЗИЦИИ НА ОСНОВЕ ФТОРИДОВ ЛИТИЯ, НАТРИЯ И КАЛИЯ

Грубцова К.А, Лисиенко Д.Г, Домбровская М.А *469*

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ PF ОСАЖДЕНИЯ НА РАЗМЕР ЧАСТИЦ ФТОРИДА ЭРБИЯ В УСЛОВИЯХ КОНТРОЛИРУЕМОГО ДВУХСТРУЙНОГО ОСАЖДЕНИЯ

Угрюмова М.В., Якушев Ю.А., Расторгуева М.И., Гасимова А.Ф. *471*

СТОХАСТИЧЕСКОЕ РАСЩЕПЛЕНИЕ ЦИКЛОВ И ПЕРЕХОД К ХАОСУ В ТЕРМОХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССАХ

Иваненко Г.А., Башкирцева И.А. *473*

РАЗРАБОТКА МЕТОДИКИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СОДЕРЖАНИЯ КИСЛОРОДА В НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОМ КАРБИДЕ НИОБИЯ

Калинина А.Е., Данилов Д.А., Курлов А.С. *475*

ХРОНОАМПЕРОМЕТРИЧЕСКИЙ СПОСОБ ОПРЕДЕЛЕНИЯ АНТИОКСИДАНТНОЙ ЕМКОСТИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КОМПЛЕКСОВ ЖЕЛЕЗА РАЗНОЙ ГИДРОФИЛЬНОСТИ

Карманова А.В., Салимгареева Е.Р., Герасимова Е.Л., Иванова А.В. *477*

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ АЭРОЗОЛЕОБРАЗОВАНИЯ ПРИ АНАЛИЗЕ СОЛЕЙ ГАЛОГЕНИДОВ МЕТАЛЛОВ МЕТОДОМ ВОССТАНОВИТЕЛЬНОГО ПЛАВЛЕНИЯ

Карташова Е.С., Данилов Д.А., Половов И.Б. *479*

МЕХАНИЗМ СОРБЦИИ УРАНА АНИОНИТОМ АМ-4ВП ИЗ СУЛЬФАТНО-ХЛОРИДНЫХ РАСТВОРОВ СКВАЖИННОГО ПОДЗЕМНОГО ВЫЩЕЛАЧИВАНИЯ

Каёткин В.Е., Титова С.М., Рычков В.Н. *481*

СОРБЦИЯ Sb (III) ИЗ РАСТВОРОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МОДИФИЦИРОВАННОГО МОНТМОРИЛЛОНИТА

Холманских И.А., Белозерова А.А., Ординарцев Д.П., Печищева Н.В., Шуняев К.Ю. *483*

ИНДУЦИРОВАННЫЕ ШУМАМИ ПЕРЕХОДЫ МЕЖДУ РАВНОВЕСНЫМИ И ОСЦИЛЛЯЦИОННЫМИ РЕЖИМАМИ В МОДЕЛИ ТЕРМОХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ

Клабукова Ю.В., Башкирцева И.А. *485*

ИССЛЕДОВАНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ПОЛИВИНИЛПИРРОЛИДОН-ИОДА В ПОЛЕ НИЗКОЧАСТОТНЫХ ВИБРОАКУСТИЧЕСКИХ ВОЗДЕЙСТВИЙ

Кокорин Н.А., Пентюхин Е.И., Богатов Н.А., Зоткин А.П., Савина А.С., Халаджан Е.А. *486*

ИОННЫЙ ОБМЕН СЛОИСТЫХ ГИДРОКСИДОВ РЗЭ В КАРБОНАТНЫХ РАСТВОРАХ

Косых А.С. *489*

ОКИСЛИТЕЛЬНОЕ РАЗЛОЖЕНИЕ КАТИОНИТА КУ-2×8 И АНИОНИТА АВ-17×8 ВОДНЫМ РАСТВОРОМ ПЕРОКСИДА ВОДОРОДА

Козлова М.М., Марков В.Ф., Маскаева Л.Н. *491*

СТРУКТУРИРОВАНИЕ РЕЦЕПТОРНОГО СЛОЯ СЕНСОРА НА ХЛОРАМФЕНИКОЛ ПОСРЕДСТВОМ ЭЛЕКТРООСАЖДЕНИЯ 3,6-БИС(ЭТИНИЛ)-9Н-КАРБАЗОЛА

Козырина Ю.В., Зайдуллина Р.А., Свалова Т.С., Вербицкий Е.В., Матерн А.И., Козицина А.Н. *493*

ИЗВЛЕЧЕНИЕ РЕНИЯ И МОЛИБДЕНА ИЗ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ ПУТЕМ СОРБЦИИ НА МОДИФИЦИРОВАННОМ МОНТМОРИЛЛОНИТЕ

Коробицына А.Д., Крутикова Е.А., Печищева Н.В., Ординарцев Д.П. *495*

ВЛИЯНИЕ СКОРОСТИ ПОТОКА ГАЗА-НОСИТЕЛЯ НА МЕТРОЛОГИЧЕСКИЕ ПОКАЗАТЕЛИ ПРИ ОПРЕДЕЛЕНИИ СОДЕРЖАНИЯ КИСЛОРОДА МЕТОДОМ ВОССТАНОВИТЕЛЬНОГО ПЛАВЛЕНИЯ

Кутовой М.Ю., Масленникова А.А. *497*

ФОТОРАЗЛОЖЕНИЕ МЕТИЛЕНОВОГО СИНЕГО ПРИ УЧАСТИИ ТОНКИХ ПЛЕНОК CuS

Лысанова М.А., Маскаева Л.Н. *499*

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ ИНТЕРФЕЙСА НА ГЕНЕРИРУЕМЫЙ АНАЛИТИЧЕСКИЙ СИГНАЛ В МЕТОДЕ ГХ-МС

Малышев А.Н., Данилов Д.А., Хорькова А.Н. *501*

ГИДРОФТОРИДНАЯ ПЕРЕРАБОТКА ТЕХНОГЕННЫХ ОТХОДОВ С ПОЛУЧЕНИЕМ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Медянкина И. С., Пасечник Л.А. *503*

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ МНОГОКРАТНОГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ТИОКАРБАМОИЛИРОВАННОГО ПОЛИЭТИЛЕНА ДЛЯ СОРБЦИИ ИОНОВ СЕРЕБРА ИЗ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СИСТЕМ

Мельник Е.А., Холмогорова А.С., Крылатова Е.Е., Неудачина Л.К., Пестов А.В. *505*

ИССЛЕДОВАНИЕ ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ РЕЖИМОВ РАБОТЫ ВЫСОКОСКОРОСТНОЙ ОТСТОЙНОЙ ЦЕНТРИФУГИ

Власова Е.А., Морданов С.В., Хомяков А.П., Шкурин П.А., Белодед М.Н., Родионов С.А. *507*

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ОБЛУЧЕНИЯ НЕОРГАНИЧЕСКИХ СОРБЕНТОВ НА ИХ СОРБЦИОННЫЕ СВОЙСТВА ПО ОТНОШЕНИЮ К ЦЕЗИЮ-137

Мухарова Т.Э., Семенищев В.С., Титова С.М., Петренко А.А., Сарычев М.Н. *509*

ЭКОГЕОХИМИЯ ТЯЖЕЛЫХ МЕТАЛЛОВ И МЕТАЛЛОИДОВ В ВОДОРАСТВОРИМОЙ ФРАКЦИИ ПОЧВ ОРЕНБУРГСКОЙ ОБЛАСТИ

Мусихина К.В., Окунева Т.Г., Киселева Д.В., Шагалов Е.С. *511*

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ТВЕРДЫХ РАДИОАКТИВНЫХ ОТХОДОВ ПРИПОВЕРХНОСТНОГО ХРАНИЛИЩА КОНВЕРСИОННОГО УРАНОВОГО ПРОИЗВОДСТВА

Наливайко К.А., Скрипченко С.Ю., Титова С.М., Семенищев В.С. *513*

ЭКСТРАКЦИЯ УРАНА ИЗ СЕРНОКИСЛЫХ РАСТВОРОВ ВЫЩЕЛАЧИВАНИЯ ОТХОДОВ КОНВЕРСИОННОГО ПРОИЗВОДСТВА

Нечкин М.А., Титова С.М., Наливайко К.А., Скрипченко С.Ю. *515*

ЭЛЕКТРОРАФИНИРОВАНИЕ МОДЕЛЬНОГО ЯДЕРНОГО ТОПЛИВА В ЭЛЕКТРОЛИТАХ, СОДЕРЖАЩИХ ХЛОРИДЫ РЗЭ

Никитин Д.И., Половов И.Б., Ребрин О.И. *517*

PREPARATION OF FUCOIDAN COATED LIPOSOSMES FOR TUBERCOLOSIS TREATMENT

Obiedallah M.M., Mironov M.A. *520*

ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ТЕРМО-ЭДС ПАРЫ Rh-Ag НА ИЗМЕРЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ УСЛОВНОГО СТАНДАРТНОГО ПОТЕНЦИАЛА РОДИЯ

Осипенко А.А. *521*

ОПРЕДЕЛЕНИЕ МОЛЬНОГО СООТНОШЕНИЕ $AlCl_3$/KCl В РАСПЛАВЕ $ZrCl_4$ – KCl – $AlCl_3$

Панфилов А.В., Коробков А.В., Бузмаков В.В., Терешин В.В., Половов И.Б., Ившина А.А. *523*

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕМЕНТНОГО СОСТАВА АЛЮМОСИЛИКАТНЫХ МИКРОСФЕР ЗОЛЬНЫХ УНОСОВ ТЕПЛОЭЛЕКТРОСТАНЦИЙ МЕТОДОМ РФА

Печищев И.В., Абрамов А.В., Устьянцев Ю.Г., Шихалеева М.А. *526*

АНАЛИЗ ГАЗОВОГО И СОЛЕВОГО СОСТАВА ФЛЮИДНЫХ ВКЛЮЧЕНИЙ ФЕНАКИТА УРАЛЬСКИХ ИЗУМРУДНЫХ КОПИЙ ПО ДАННЫМ СПЕКТРОСКОПИИ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА

Печурин М.С., Панкрушина Е.А., Жилин А.С. *528*

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ КЕРАМИКИ В ПРОЦЕССЕ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО СТАРЕНИЯ

Пилюгина О.В., Хорошавцева Н.В., Денисова Э.И., Карташов В.В., Меркулов О.В. *530*

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ КЕРАМИКИ В ПРОЦЕССЕ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО СТАРЕНИЯ

Поимцева В.Ю., Хорошавцева Н.В., Денисова Э.И., Карташов В.В., Денисова О.В. *532*

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЗНАЧЕНИЯ РН ГИДРОЛИЗА НА ИЗМЕНЕНИЕ РАЗМЕРОВ ЧАСТИЦ ВО ВРЕМЯ ОСАЖДЕНИЯ И В ХОДЕ ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ

Поливода Д.О., Машковцев М.А. *534*

ВЛИЯНИЕ ЛЕГИРУЮЩЕЙ ПРИМЕСИ КОБАЛЬТА НА ФОТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТОНКИХ ПЛЕНОК PbS

Поздин А.В., Маскаева Л.Н. *537*

ИЗУЧЕНИЕ ТИПА ИОНА ОТВЕСТСВЕННО ЗА ПЕРЕНОС В $Na_3DyV_2O_8$

Разгуляева В.М., Леонидова О.Н. *539*

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕМЕНТНОГО И ИЗОТОПНОГО СОСТАВА $^{87}Sr/^{86}Sr$ ДЛЯ АУТЕНТИФИКАЦИИ И ОЦЕНКИ ГЕОГРАФИЧЕСКОГО ПРОИСХОЖДЕНИЯ РОССИЙСКИХ ВИН

Рыбакова А.Д., Окунева Т.Г., Киселева Д.В., Шагалов Е.С. *541*

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ УГЛЕРОДНЫХ ПЛАНАРНЫХ ЭЛЕКТРОДОВ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ АНТИОКСИДАНТНОЙ ЕМКОСТИ В ПОТЕНЦИОМЕТРИЧЕСКИХ ПОРТАТИВНЫХ УСТРОЙСТВАХ

Салимгареева Е.Р., Саликова К.К., Герасимова Е.Л., Иванова А.В. *543*

МЕТОД ВЫРАЩИВАНИЯ НИТЕВИДНЫХ НАНОКРИСТАЛЛОВ ДИОКСИДА КРЕМНИЯ

Небольсин В.А., Самофалова А. С. *545*

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЗНАЧЕНИЯ РН ОСАЖДЕНИЯ НА СТЕПЕНЬ СООСАЖДЕНИЯ ГАДОЛИНИЯ С ГИДРОКСИДОМ ЦИРКОНИЯ В ХОДЕ КОНТРОЛИРУЕМОГО ОСАЖДЕНИЯ

Сазонов И.М., Баженова Е.С., Буйначев С.В. *547*

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ КОМПОНЕНТОВ В КВАРЦЕВОМ ПЕСКЕ МЕТОДОМ РЕНТГЕНОФЛУОРЕСЦЕНТНОГО АНАЛИЗА

Шаденко И.П., Абрамов А.В., Чекунова А.А. *550*

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ СОВМЕСТНОГО ВЫДЕЛЕНИЯ СТРОНЦИЯ, БАРИЯ, ЛАНТАНА И УРАНА ИЗ ХЛОРИДНЫХ РАСПЛАВОВ МЕТОДОМ ФОСФАТНОГО ОСАЖДЕНИЯ

Шарипова М.М., Иванов А.Б., Волкович В.А., Малышев А.С. *551*

ЭЛЕКТРОТЕРМИЧЕСКОЕ АТОМНО-АБСОРБЦИОННОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ГАЛЛИЯ ПОСЛЕ ЕГО КОНЦЕНТРИРОВАНИЯ НА СУСПЕНЗИИ МЕХАНОАКТИВИРОВАННОГО АНАТАЗА

Зайцева П. В., Шатунов Д. Е., Коробицына А.Д., Васильева Н. Л., Печищева Н. В. *553*

СОРБЦИОННОЕ ИЗВЛЕЧЕНИЕ ИОНОВ СЕРЕБРА ИЗ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ РАСТВОРОВ НА МОДИФИЦИРОВАННОМ ПОЛИСИЛСЕСКВИОКСАНЕ

Щербинин П.А., Мельник Е.А., Осипова В.А., Пестов А.В., Холмогорова А.С., Неудачина Л.К. *556*

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ V, As, Fe, Cl И ДРУГИХ КОМПОНЕНТОВ В ВАНАДИЕВЫХ КАТАЛИЗАТОРАХ

Шихалеева М.А., Абрамов А.В., Печищев И.В., Устьянцев Ю.Г. *558*

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ ИОНОВ УРАНИЛА В РАСПЛАВАХ НА ОСНОВЕ FLiNaK

Смирнова В.В., Волкович В.А. *560*

SYNTHESIS OF STABILIZED ALUMINUM OXIDE FOR APPLICATION AS A SUPPORT FOR AUTOMOBILE CATALYST

Solodovnikova P.A., Mashkovtsev M.A., Galiaskarova M.R., Rychkov V.N., Akulov A.V. *562*

РАСЧЕТНО-ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ГАЗИФИКАЦИИ КОКСОВОГО ОСТАТКА БИОМАССЫ

Спиридонов К.Е., Никитин А.Д., Рыжков А.Ф. *564*

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НИКЕЛЯ В РАСПЛАВЕ LiF-NaF-KF

Степанова М.Ю., Смирнова В.В., Волкович В.А. *566*

СОРБЦИОННО-СПЕКТРОСКОПИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ИОНОВ КАДМИЯ (II)

Стрельцова Х.И., Лакиза Н.В. *568*

РАЗРАБОТКА И АПРОБАЦИЯ МЕТОДА ОПРЕДЕЛЕНИЯ СОДЕРЖАНИЯ CS-137 В ПРИРОДНЫХ ВОДАХ

Суетина А.К., Воронина А.В. *570*

СРАВНЕНИЕ СТРУКТУРНО-ДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ГАЗОДИСПЕРСНОГО ПОТОКА ДЛЯ РЕЖИМОВ ГОРЕНИЯ И ГАЗИФИКАЦИИ ДЛЯ РАЗЛИЧНЫХ ТОПЛИВ ВО ВЛАЖНОМ СОСТОЯНИИ

Суворин И.Д., Рыжков А.Ф. *572*

ИССЛЕДОВАНИЕ РЕСУРСОСБЕРЕГАТЕЛЬНОГО МЕТОДА СИНТЕЗА ВЫСОКОДИСПЕРСНОГО КАРБОНАТА КАЛЬЦИЯ

Тихонравов А.А., Богатов Н.А., Пентюхин Е.И., Савина А.С., Зоткин А.П. *574*

АНОДНОЕ РАСТВОРЕНИЕ ГАЛЛИЯ В ХЛОРИДНЫХ РАСПЛАВАХ

Токарев О.В., Волкович В.А. *576*

ПРЕДВАРИТЕЛЬНОЕ КОНЦЕНТРИРОВАНИЕ Pb-210 ИЗ ВОДНЫХ ПРОБ БОЛЬШОГО ОБЪЁМА В МЕТОДИКЕ АНАЛИЗА РАЗЛИЧНЫМИ СПОСОБАМИ

Топоркова В. Д., Семенищев В.С. *578*

МЕТОДИКА ОПРЕДЕЛЕНИЯ СОДЕРЖАНИЯ ОСНОВНЫХ И ПРИМЕСНЫХ КОМПОНЕНТОВ В СПЛАВАХ ФЕРРОВАНАДИЯ МЕТОДОМ РЕНТГЕНОФЛУОРЕСЦЕНТНОЙ СПЕКТРОМЕТРИИ

Трубачева Е.М., Абрамов А.В., Ребрин О.И., Жиляков А.Ю. *580*

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ КИСЛОРОДА СУЛЬФАТА МЕТОДОМ ВОССТАНОВИТЕЛЬНОГО ПЛАВЛЕНИЯ

Тюфякова Д.С., Данилов Д.А., Ившина А.А. *582*

ОПРЕДЕЛЕНИЕ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ В СМОЛЕ PUROLITE C160 С ПОМОЩЬЮ РЕНТГЕНОФЛУОРЕСЦЕНТНОГО АНАЛИЗА

Уланова О.Д., Попова А.А., Абрамов А.В., Буньков Г.М. *584*

ЭЛЕКТРООСАЖДЕННЫЕ ПОЛИМЕРЫ С МОЛЕКУЛЯРНЫМИ ОТПЕЧАТКАМИ ХЛОРАМФЕНИКОЛА НА ОСНОВЕ ПЕНТАФТОРФЕНИЛ-2Н-ИМИДАЗОЛ ПРОИЗВОДНЫХ КАРБАЗОЛА: ПОЛУЧЕНИЕ И СВОЙСТВА

Ведерникова Е.Д., Зайдуллина Р.А., Свалова Т.С., Мосеев Т.Д., Вараксин М.В., Козицина А.Н. *586*

ЭЛЕКТРОДНЫЕ ПОТЕНЦИАЛЫ ЦИРКОНИЯ В ЖИДКОМЕТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ С ГАЛЛИЕМ И СПЛАВАМИ НА ЕГО ОСНОВЕ

Яковлев А.В., Новикова М.Н., Волкович В.А. *588*

МЕТОД ОЧИСТКИ ВОДЫ ОТ ИОНОВ ЖЕЛЕЗА (II) С ПОМОЩЬЮ ВИБРОАКУСТИЧЕСКОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ

Журавлева М.О., Богатов Н.А., Савина А.С., Пентюхин Е.И., Зоткин А.П. *590*

СЕКЦИЯ 5. МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ

СИНТЕЗ, СТРУКТУРА И ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА НОВЫХ Ba- И Sr-ЗАМЕЩЕННЫХ СЛОИСТЫХ ПЕРОВСКИТОВ НА ОСНОВЕ $BaNd_2In_2O_7$

Абакумова Е.В., Бедарькова А.О., Тарасова Н.А., Анимица И.Е. *593*

СИНТЕЗ И ПОЛУЧЕНИЕ СЛОИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ КЕРАМИКИ НА ОСНОВЕ СТАННАТА БАРИЯ

Акопян М.Т., Звонарева И.А., Старостин Г.Н., Медведев Д.А. *595*

ВЛИЯНИЕ ДЕФЕКТОВ НА СВОЙСТВА НОВОЙ ОПТИЧЕСКОЙ МАТРИЦЫ $Li_9Mg_3[PO_4]_4F_3$

Акулов Д.А., Калинкин М.О., Абашев Р.М., Сюрдо А.И., Медведева Н.И., Келлерман Д.Г. *598*

ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА АНИОН-ДЕФИЦИТНЫХ ГЕКСАГОНАЛЬНЫХ ПЕРОВСКИТОВ $Ba_5In_2Al_2ZrO_{13}$ И $Ba_7In_6Al_2O_{19}$

Андреев Р.Д., Анимица И.Е. *600*

АГРЕГАТИВНАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ ГИДРОЗОЛЯ h-BN В ПРИСУТСТВИИ NaCl

Барилюк Д. В., Конопацкий А. С., Калинина В. В., Штанский Д. В. *602*

КАЛИБРОВКА ВОЛОЧЕНИЕМ АЛЮМИНИЕВОЙ ТРУБКИ В ЛИНИИ КОНФОРМ

Базан Д.А., Горохов Ю.В., Фролов И.В., Косяченко И.С. *604*

МЕХАНОАКТИВИРОВАННЫЙ АНАТАЗ КАК СОРБЕНТ И ФОТОКАТАЛИЗАТОР ДЛЯ УДАЛЕНИЯ Cr(VI) ИЗ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ

Печищева Н.В., Бурдина Л.Г., Зайцева П.В., Сушникова А.А., Эстемирова С.Х., Конышева Е.Ю., Шуняев К.Ю. *606*

ПОЛУЧЕНИЕ ПОРОШКОВ НА ОСНОВЕ ДИОКСИДА ЦИРКОНИЯ ДЛЯ ИЗУЧЕНИ СВОЙСТВ КЕРАМИКИ

Чехова А.С., Хорошавцева Н.В., Беспоместных Ю.А., Денисова Э.И., Карташов В.В., Денисова О.В. *608*

ПРОТОННЫЙ ПЕРЕНОС В СЛОИСТЫХ ПЕРОВСКИТАХ $BaLa_{0.9}M_{0.1}InO_4$ (M = Nd, Gd) И $BaLaIn_{0.9}M_{0.1}O_4$ (M = Sc, Y)

Черемисина П.В., Абакумова Е.В., Бедарькова А.О., Тарасова Н.А., Анимица И.Е. *610*

РАЗМЕРНЫЙ ЭФФЕКТ В МАГНЕТОКАЛОРИЧЕСКИХ МАНГАНИТАХ $Nd_{0.85}Me_{0.15}MnO_3$ (Me=Ca, Sr, Ba)

Черепанова Л.А., Митрофанов В.Я., Эстемирова С.Х., Упоров С.А. *612*

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ПОЛНОГО СПЛАВА ГЕЙСЛЕРА Mn_2NiAl

Чернов Е. Д., Лукоянов А. В. *614*

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОПЕРЕНОСА ПРИ ИЗМЕРЕНИИ ТЕМПЕРАТУРОПРОВОДНОСТИ РАСПЛАВА СОЛИ LiF–NaF–KF МЕТОДОМ ЛАЗЕРНОЙ ВСПЫШКИ

Чернышев С.В., Руденко А.В., Хрустов А.В., Редькин А.А., Власов М.И. *616*

ИССЛЕДОВАНИЕ ВАКАНСИЙ НА ДВУМЕРНОМ СЛОЕ h-BCN

Четвериков И.В., Борознина Е.В. *618*

МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА И ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА СИСТЕМЫ СПЛАВОВ $Co_XCu_{2-X}MnAl$

Дедов И.С., Лукоянов А.В *620*

ДЕГРАДАЦИЯ ГИБРИДНЫХ ОРГАНОМЕТАЛЛИЧЕСКИХ ПЕРОВСКИТОВ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ГАММА-ИЗЛУЧЕНИЯ ПО ДАННЫМ РФЭС

Дерендяева Е.П., Озерова В.В., Трошин П.А., Жидков И.С. *622*

ТЕРМИЧЕСКИЕ, СТРУКТУРНЫЕ И ФЛЮОРЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА $(Sm_{0.5}Eu_{0.5})(Fe_{0.5}Cr_{0.5})O_3$

Ермолаева Ю.В., Конышева Е.Ю., Ведмидь Л.Б., Федорова О.М., Печищева Н. В. *624*

ДЕФОРМАЦИОННО-ДИНАМИЧЕСКОЕ СТАРЕНИЕ В ОБРАЗЦАХ ИЗ АУСТЕНИТНОЙ СТАЛИ, ПОЛУЧЕННЫХ ЛАЗЕРНОЙ 3D ПЕЧАТЬЮ

Ежов И.В., Коэмец Ю.Н., Казанцева Н.В., Давыдов Д.И., Афанасьев С.В., Коэмец О.А. *626*

ИОННАЯ ПРОВОДИМОСТЬ В Ba- И Sr- ЗАМЕЩЕННЫХ СЛОИСТЫХ ПЕРОВСКИТАХ НА ОСНОВЕ $BaLa_2In_2O_7$

Федорова И.С., Абакумова Е.В., Бедарькова А.О., Тарасова Н.А., Анимица И.Е. *627*

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ДЛИТЕЛЬНОГО СТАРЕНИЯ НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СПЛАВА VDM® ALLOY 59

Гибадуллина А.Ф., Хотинов В.А., Половов И.Б., Ребрин О.И. *629*

АНАЛИЗ ОКАТАННОСТИ КВАРЦА В ПОВЕРХНОСТНО ДЕПОНИРОВАННЫХ ОТЛОЖЕНИЯХ УРБАНИЗИРОВАННОЙ СРЕДЫ (НА ПРИМЕРЕ Г. РОСТОВ-НА-ДОНУ)

Глухов В.С., Панкрушина Е.А., Селезнев А.А., Малиновский Г. П., Ярмошенко И.В. *630*

ИОННАЯ ПРОВОДИМОСТЬ В СЛОИСТОМ ПЕРОВСКИТЕ $SrLa_2Sc_2O_7$

Гнатюк В.Д., Абакумова Е.В., Бедарькова А.О., Тарасова Н.А., Анимица И.Е. *633*

$Pr_{1-X}Ba_XFeO_3$ В КАЧЕСТВЕ ЭЛЕКТРОДНОГО МАТЕРИАЛА ДЛЯ СИММЕТРИЧНЫХ ПРОТОННО-КЕРАМИЧЕСКИХ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ ЯЧЕЕК

Гордеева М.А., Медведев Д.А. *635*

ВЫСОКОПРОВОДЯЩИЙ ТВЕРДЫЙ ЭЛЕКТРОЛИТ $(La,Sr)(Ga,Fe,Mg)O_{3-\delta}$: ВЛИЯНИЕ КАТИОНОВ ЖЕЛЕЗА НА СТРУКТУРНЫЕ И ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА

Гордеев Е.В., Осинкин Д.А. *637*

PHYSICO-CHEMICAL PROPERTIES OF LANTHANUM COMPOUNDS AS CATHODE MATERIALS FOR SOLID OXIDE FUEL CELLS

Guseva E.M., Kolchugin A.A., Ivanov R.A., Filonova E.A. *639*

CRYSTAL STRUCTURE AND PHASE TRANSITIONS OF THE PEROVSKITE-LIKE RARE-EARTH COMPLEX OXIDES

Ivanova A.S., Ivanov R.A., Filonova E.A. *641*

КАРБОТЕРМИЧЕСКОЕ ВОССТАНОВЛЕНИЕ ОКСИДА МОЛИБДЕНА(VI) НА ПОВЕРХНОСТИ АКТИВИРОВАННОГО УГЛЯ

Калинина В.В., Конопацкий А.С., Барилюк Д.В., Штанский Д.В. *643*

ПОЛУЧЕНИЕ ПОРОШКОВ НА ОСНОВЕ ДИОКСИДА ЦИРКОНИЯ С ДОБАВКАМИ РЗЭ ДЛЯ ИЗУЧЕНИ СВОЙСТВ КЕРАМИКИ

Хорошавцева Н.В., Денисова Э.И., Карташов В.В., Денисова О.В., Меркулов О.В. *645*

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ГЕТЕРОГЕННЫХ НАНОСТРУКТУРНЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ Ag/MgO/BN

Конопацкий А. С., Калинина В.В., Барилюк Д.В., Штанский Д.В. *647*

РАЗРАБОТКА ЗАЩИТНОГО ПОКРЫТИЯ ПРОТИВ КАВИТАЦИОННОГО И ЭЛЕКТРОКОРОЗИЙННОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПОРОШКОВОГО ОКРАСА С ДОБАВЛЕНИЕМ УНТ

Коршаков Н.А., Кузин И.В. *649*

МОДИФИЦИРУЮЩИЕ ДОБАВКИ Al-Cu-Zr ДЛЯ АЛЮМИНИЕВЫХ СПЛАВОВ

Котенков П.В., Попова Э.А., Гилев И.О., Подкин Е.С. *651*

МЕТОДИКА ИЗМЕРЕНИЙ МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ ВЕЩЕСТВА В ОТКРЫТОЙ МАГНИТНОЙ ЦЕПИ

Ксенофонтов Д.Г., Костин В.Н., Василенко О.Н. *653*

ИССЛЕДОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПОКРЫТИЙ НА ОСНОВЕ СИСТЕМЫ WC-nCo

Куклин И.Э., Барашев Н.Р., Идиятулин А.А., Савельев Д.Д., Коренева Е.А. *655*

РАДИАЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ В СПЕКТРАХ ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ И КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ α-In_2Se_3

Лобанов А.Д., Сулимов М.А., Корх Ю.В., Патраков Е. И., Радзивончик Д.И., Гавико В.С., Сарычев М.Н., Иванов В.Ю., Кузнецова Т.В. *657*

НОВЫЕ КРИТЕРИИ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ СОСТАВОВ СПЛАВОВ СИСТЕМЫ Sc-Co-Al СО СТЕКЛООБРАЗУЮЩЕЙ СПОСОБНОСТЬЮ

Майорова А.В., Куликова Т.В., Коваленко Д.А. *659*

СПЕКТРАЛЬНО-ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА $NaY_{1-X}Tm_XGeO_4$ В ИК ДИАПАЗОНЕ

Меленцова А.А., Липина О.А., Чуфаров А.Ю., Тютюнник А.П., Зубков В.Г. *660*

ВЛИЯНИЕ ВОДОНАСЫЩЕННОСТИ НА ПРОЧНОСТНЫЕ СВОЙСТВА ГОРНЫХ ПОРОД

Меженов М.Е., Куклина А.А., Зайцев Д.В., Панфилов П.Е. *662*

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕКСТУРЫ МЕТЕОРИТНОЙ БРЕКЧИИ ИЗ ВЕЩЕСТВА ОБЫКНОВЕННЫХ ХОНДРИТОВ ПОСРЕДСТВОМ ТЕРМИЧЕСКИХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

Муфтахетдинова Р.Ф., Яковлев Г.А., Брусницына Е.В. *664*

МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА GdRuSi ДЛЯ МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКОГО СЖИЖЕНИЯ АЗОТА

Мухачев Р.Д., Лукоянов А.В., Кучин А.Г., Платонов С.П. *667*

ПОЛУЧЕНИЕ ТВЕРДЫХ ЭЛЕКТРОЛИТОВ НА ОСНОВЕ ZrO_2 МЕТОДОМ АТМОСФЕРНОГО ПЛАЗМЕННОГО НАПЫЛЕНИЯ

Павлов И.С., Валиев Р.М., Карташов В.В., Куклин И.Э., Барашев Н.Р. *669*

ПРОЧНОСТНЫЕ СВОЙСТВА ВОЛЬФРАМА, ПОДВЕРГНУТОГО ИНТЕНСИВНЫМ ДЕФОРМАЦИЯМ ПОД ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ

Перескокова К.И., Пилюгин В.П., Поставалова К.А., Куклина А.А., Зайцев Д.В., Панфилов П.Е. *671*

ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ СИНТЕЗА НА МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ПЕРОВСКИТОВ НА ОСНОВЕ МАНГАНИТА ЛАНТАНА, ДОПИРОВАННОГО ИОНАМИ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ (Li-Cs)

Пермякова А.Е., Русских О.В., Остроушко А.А. *673*

ОПТИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ИНФРАКРАСНОЙ ОПТИКИ НА ОСНОВЕ СИСТЕМ $AgCl_{0.25}Br_{0.75} – TlCl_{0.74}Br_{0.26}$ И $AgCl_{0.25}Br_{0.75} – TlBr_{0.46}I_{0.54}$

Пестерева П.В., Жукова Л.В. *675*

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ СВОЙСТВ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ КАРБИДОВ С ПРИМЕНЕНИЕМ ПОТЕНЦИАЛА МЕЖАТОМНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА ОСНОВЕ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

Пикалова Н.С., Балякин И.А., Юрьев А.А., Ремпель А.А. *677*

КИНЕТИКА АТОМНОГО УПОРЯДОЧЕНИЯ В НЕСТЕХИОМЕТРИЧЕСКОМ СПЛАВЕ Cu-56ат.%Au

Подгорбунская П.О., Новикова О.С., Глухов А.В., Кругликов Н.А., Волков А.Ю. *680*

ФОРМИРОВАНИЕ СПЛАВОВ Al-Y ДОЭВТЕКТИЧЕСКОГО СОСТАВА С МАЛЫМИ ДОБАВКАМИ Sc И Zr

Подкин Е.С., Котенков П.В., Шубин А.Б., Гилёв И.О., Попова. Э.А. *682*

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ КЕРАМИКИ ТИТАНАТА БАРИЯ-СТРОНЦИЯ С ДОБАВКОЙ ВИСМУТА

Попов И.И. *684*

КАТАЛИЗАТОРЫ НА ОСНОВЕ g-C_3N_4 ДЛЯ ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКОГО ПОЛУЧЕНИЯ ВОДОРОДА ПОД ДЕЙСТВИЕМ ВИДИМОГО СВЕТА

Потапенко К.О., Козлова Е.А. *686*

ЯМР Fe В НАНОЧАСТИЦАХ КАРБИДА ЖЕЛЕЗА Fe_3C

Прокопьев Д.А., Гермов А.Ю., Михалёв К.Н., Уймин М.А., Новиков С.И., Гавико В.С., Минин А.С. *688*

СИНТЕЗ, СТРУКТУРА И ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА Sc-ДОПИРОВАННЫХ СЛОИСТЫХ ПЕРОВСКИТОВ НА ОСНОВЕ $SrLa_2Sc_2O_7$

Пьянков Д.Н., Абакумова Е.В., Бедарькова А.О., Тарасова Н.А., Анимица И.Е. *690*

ВЛИЯНИЕ ЧАСТИЧНОГО ЗАМЕЩЕНИЯ СВИНЦА НА СТАБИЛЬНОСТЬ ГИБРИДНЫХ ПЕРОВСКИТОВ К МОЩНЫМ ПОТОКАМ ЭЛЕКТРОНОВ

Расметьева А.В., Устинова М.И., Кухаренко А.И., Сарычев М.Н., Трошин П.А., Жидков И.С. *692*

ЭЛЕКТРОФОРЕТИЧЕСКОЕ ОСАЖДЕНИЕ ПЛЕНОК НА ОСНОВЕ ДИОКСИДА ЦЕРИЯ, МОДИФИЦИРОВАННОГО $SrTiO_3$, ДЛЯ ТОТЭ С НЕСУЩИМ АНОДОМ

Русакова Д.С., Павлова И.А., Ермакова Л.В., Пикалова Е.Ю., Калинина Е.Г. *694*

РАЗРАБОТКА КИСЛОРОДНЫХ АККУМУЛЯТОРОВ $SrFe_{12}O_{19}$ И $BaFe_{12}O_{19}$ ДЛЯ ТЕХНОЛОГИИ ХИМИЧЕСКОГО ЦИКЛИРОВАНИЯ

Рыжов Д. А., Меркулов О. В. *697*

СРАВНЕНИЕ ВЕЛИЧИН ВЯЗКОСТИ, ТЕМПЕРАТУРЫ СТЕКЛОВАНИЯ И ПЛОТНОСТИ РАСПЛАВА XNa_2O-(100-X) B_2O_3 ОТ СОСТАВА

Самойлова М.А., Хохряков А.А., Ведмидь Л.Б. *699*

СПЕКТРАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ В ОЦЕНКЕ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ СПЛАВОВ GdTbDyHoSc И GdTbDyHoY

Скрыльник М.Ю., Зайцева П.В., Сипатов И.С., Шуняев К.Ю. *701*

РАЗРАБОТКА МЕТОДОВ СИНТЕЗА И ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ ПЕРОВСКИТОВ НА ОСНОВЕ $CeAlO_3$

Смелов А.О., Корона Д.В., Анимица И.Е. *704*

ИМПУЛЬСНО-ДУГОВАЯ СВАРКА В ЗАЩИТНЫХ ГАЗАХ С ДОПОЛНИТЕЛЬНОЙ ГОРЯЧЕЙ ПРИСАДКОЙ ВЫСОКОПРОЧНЫХ ЗАКАЛИВАЮЩИХСЯ СТАЛЕЙ

Смоленцев М.С., Смоленцев А.С. *706*

СТРУКТУРА И ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТРОЙНОГО Cu/Al/Mg-КОМПОЗИТА

Калонов А.А., Сухачев П.В., Волков А.Ю. *709*

ДОПИРОВАННЫЕ НИКЕЛАТЫ ЛАНТАНА КАК КАТОДНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ТОТЭ

Суханов К.С., Гилев А.Р., Киселев Е.А., Черепанов В.А. *712*

ИЗУЧЕНИЕ ВНУТРЕННЕЙ СТРУКТУРЫ И МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ НАНОЧАСТИЦ НА ОСНОВЕ БИНАРНЫХ СПЛАВОВ FeMe@C (Me=Co,Ni) МЕТОДОМ ЯМР

Суворкова Е.В., Гермов А.Ю., Прокопьев Д.А., Конев А.С., Уймин М.А., Минин А.С., Ермаков А.Е., Голобородский Б.Ю., Курмачёв И.А. *714*

АЛЬТЕРНАТИВНЫЕ КРИТЕРИИ ОЦЕНКИ КОРРОЗИОННЫХ РАЗРУШЕНИЙ ПОСЛЕ ВЫДЕРЖКИ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ В РАСПЛАВАХ СОЛЕЙ

Трубченинова А.И. Абрамов А.В., Алимгулов Р.Р., Половов И.Б., Ребрин О.И. *716*

ПОЛУЧЕНИЕ ПОРОШКОВ НА ОСНОВЕ ДИОКСИДА ЦИРКОНИЯ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ ЭЛЕКТРОПРОВОДЯЩИХ СВОЙСТВ КЕРАМИКИ

Вандышева П.И., Хорошавцева Н.В., Беспоместных Ю.А., Денисова Э.И., Карташов В.В., Меркулов О.В. *717*

НОВЫЕ СОДОПИРОВАННЫЕ СЛОИСТЫЕ ПЕРОВСКИТЫ НА ОСНОВЕ $BaLa_2In_2O_7$: СИНТЕЗ И ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА

Веринкина Е.М., Абакумова Е.В., Бедарькова А.О., Тарасова Н.А., Анимица И.Е. *719*

ВЛИЯНИЕ ЗАМЕЩЕНИЯ А-КАТИОНА НА СТАБИЛЬНОСТЬ ГИБРИДНЫХ ПЕРОВСКИТОВ К МОЩНЫМ ПОТОКАМ ЭЛЕКТРОНОВ

Расметьева А.В., Воробьев С.Т., Озерова В.В., Кухаренко А.И., Сарычев М.Н., Трошин П.А., Жидков И.С. *721*

ВЛИЯНИЕ ТЕХНОЛОГИИ ИЗГОТОВЛЕНИЯ ПОЛИЭТИЛЕНА ВЫСОКОЙ ПЛОТНОСТИ С ДОБАВЛЕНИЕМ ПУЦЦОЛАНЫ И МУКИ ИЗ ОЛИВКОВЫХ ВЫЖИМОК НА ЕГО РАДИАЦИОННО-ЗАЩИТНЫЕ СВОЙСТВА

Воронин И. П., Ширина А.М., Ташлыков О.Л., Аладаилах М.В. *723*

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ЭКСТРУЗИИ ИНФРАКРАСНЫХ СВЕТОВОДОВ НА ОСНОВЕ ГАЛОГЕНИДОВ СЕРЕБРА И ТАЛЛИЯ (I)
Южаков И.В., Салимгареев Д.Д., Южакова А.А., Жукова Л.В. *725*

ИССЛЕДОВАНИЕ МОДИФИЦИРОВАННЫХ ТЕПЛОЗАЩИТНЫХ ПОКРЫТИЙ НА ОСНОВЕ ZrO_2
Закиров И.Ф., Банных С.А., Шак А.В. *727*

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТА ХИМИЧЕСКОЙ ДИФФУЗИИ И КОНСТАНТЫ ПОВЕРХНОСТНОГО ОБМЕНА КИСЛОРОДОМ $GdBaCo_{2-x}Fe_xO_{6-\delta}$
Закирьянов П.О., Иванов И.Л., Цветков Д.С., Зуев А.Ю., Середа В.В., Малышкин Д.А. .. *729*

ПРОТОННАЯ ПРОВОДИМОСТЬ В СОДОПИРОВАННЫХ (Sr → La; Ca → In) СЛОИСТЫХ ПЕРОВСКИТАХ НА ОСНОВЕ $BaLa_2In_2O_7$
Завиралова В.Д., Абакумова Е.В., Бедарькова А.О., Тарасова Н.А., Анимица И.Е. *731*

ПОЛУЧЕНИЕ ТОНКИХ КЕРАМИЧЕСКИХ ПЛЕНОК МЕТОДОМ АЭРОЗОЛЬНОГО НАПЫЛЕНИЯ
Завьялов М.А., Меркулов О.В. *733*

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КОМПАКТНЫХ И ВОЛОКНИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ НАНОСТРУКТУРНОГО МЕДЬ-НИОБИЕВОГО КОМПОЗИТА
Зайцев Е.Ю., Спирин А.В., Заяц С.В., Кайгородов А.С., Паранин С.Н. *736*

SPECTRAL RESPONSE IN LASER SYNTHESIZED $W_xMo_{(1-X)}S_2$ ALLOYS
Zharkova E.V., Averchenko A.V., Salimon I.A., Abbas O.A., Lagoudakis P.G., Mailis S. *739*

ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ ОБЖИГА ДИОКСИДА ЦИРКОНИЯ НА СВОЙСТВА КЕРАМИКИ
Жиренкина Н.В., Косых А.С., Буйначев С.В. *741*

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СЛОЖНОГО ОКСИДА $Pr_{1.6}Ca_{0.4}Ni_{1-y}Cu_yO_4$ В КАЧЕСТВЕ КАТОДНОГО МАТЕРИАЛА ДЛЯ СРЕДНЕТЕМПЕРАТУРНЫХ ТОТЭ
Жуланова Т.Ю., Иванова А.С., Цвинкинберг В.А., Русских О.В., Филонова Е.А., Пикалова Е.Ю. *743*

СЕКЦИЯ 6. ИНФОРМАЦИОННЫЕ СИСТЕМЫ И ТЕХНОЛОГИИ

РАЗРАБОТКА ВЕБ-ПРИЛОЖЕНИЯ ДЛЯ СЕГМЕНТАЦИИ СОДЕРЖИМОГО HTML-СТРАНИЦ МЕТОДАМИ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ
Алексеева А.А. *746*

РАЗРАБОТКА ПОДХОДА ДЛЯ ПРАКТИЧЕСКОЙ РЕАЛИЗАЦИИ АВТОНОМНОЙ ОХРАНЫ ПРОИЗВОЛЬНОГО КОМПЛЕКСА ПОМЕЩЕНИЙ ПРИ ПОМОЩИ PEDD
Андрусик М. С., Кашин И. В. *748*

РАЗРАБОТКА ПРОТОТИПА МОДЕЛИ КРОВОТОКА В ПЕЧЕНИ
Аскарова Е.Ф., Соловьева С.Н. *750*

О ВЗАИМОДЕЙСТВИИ ИНФОРМАЦИОННЫХ ПРОДУКТОВ ТЕНДЕРНОГО СПЕЦИАЛИСТА И ЕГО РУКОВОДИТЕЛЯ
Банников И. К., Гольдштейн С. Л. *752*

СТОХАСТИЧЕСКАЯ ДИНАМИКА В СИСТЕМЕ ДВУХ ПЕРИОДИЧЕСКИХ ПОПУЛЯЦИЙ, СВЯЗАННЫХ ВЗАИМНОЙ МИГРАЦИЕЙ
Беляев А.В., Ряшко Л.Б. *754*

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ОЦЕНКИ ИОННОГО СОСТАВА ПРОМЫШЛЕННОЙ МОЛОЧНОЙ ПРОДУКЦИИ
Чередникова А.А., Мазинг М.С., Романова В.В., Зайцева А.Ю. *756*

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ПОСТОЯННОЙ СВЕРХТОНКОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ СПЕКТРОВ ЭПР РН-ЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ НИТРОКСИЛЬНЫХ РАДИКАЛОВ АЛГОРИТМАМИ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ
Давыдов Д. Р., Антонов Д.О., Ковалева Е.Г. *758*

РАЗВИТИЕ IT-ПОДДЕРЖКИ ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО ИССЛЕДОВАНИЯ СВОЙСТВ ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ
Дроздов В.А., Филанович А.Н. *760*

ОБНАРУЖЕНИЕ ПУТИ СЛЕДОВАНИЯ ЛОКОМОТИВА НА ОСНОВЕ СВЕРТОЧНЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ
Федоров В.А., Огородникова О.М. *762*

РАЗРАБОТКА МЕТОДА ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНОГО ДЕТЕКТИРОВАНИЯ ОБЪЕКТОВ С ПОМОЩЬЮ PEDD
Галина Е.М., Кашин И.В. *764*

ОБ ОЦЕНИВАНИИ ЭМЕРДЖЕНТНОСТИ ОНТОЛОГИЙ И ИХ ФРАГМЕНТОВ
Гольдштейн С.Л., Кудрявцев А.Г., Гунбин С.В. *766*

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И АНАЛИЗ КАЛЬЦИЕВЫХ РЕЛАКСАЦИОННЫХ АВТОКОЛЕБАНИЙ В УСЛОВИЯХ СЛУЧАЙНЫХ ВОЗМУЩЕНИЙ
Качусов С.М., Башкирцева И.А. *768*

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ВРАЩАЮЩАЯСЯ ВОЛНА В ТОНКОМ СЛОЕ ВОДЫ. ЧИСЛЕННЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ
Керекелица И.В., Мартюшев Л.М. *770*

ПОСТРОЕНИЕ ЦИФРОВОГО ДВОЙНИКА НЕЙРОНОВ МОТОРНОЙ КОРЫ МЫШИ
Кашин И.В., Хасанова А.С. *772*

САМООРГАНИЗАЦИЯ В МОДЕЛЯХ РЕАКЦИИ-ДИФФУЗИИ НА ПЛОСКОСТИ: ТЬЮРИНГОВСКИЕ ПАТТЕРНЫ И МУЛЬТИСТАБИЛЬНОСТЬ
Колиниченко А.П., Ряшко Л.Б. *773*

АЛГОРИТМ ГЕНЕРАЦИИ ДЕЙСТВЕННЫХ РЕКОМЕНДАЦИЙ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ПРОБЛЕМЫ ПЕРЕГРУЖЕННОСТИ АВТОМОБИЛЬНЫХ ДОРОГ
Котляренко Н.А., Кашин И.В. *775*

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТАНГЕНЦИАЛЬНОЙ УЛЬРАФИЛЬТРАЦИИ НА ПРИМЕРЕ ВОДЫ: ФОКУС НА РАЗРАБОТКУ ЦИФРОВОГО ДВОЙНИКА
Козлов Н.В., Комарова В.А., Лаптев Р.А., Черепанов А.Н. *776*

БОРЬБА С ИОХВ КАК ЗАДАЧА ОБ ОНТОЛОГИИ БАЗОВЫХ ПОНЯТИЙ О ПОМЕХЕ УПРАВЛЕНИЮ
Кузнецова Т.С., Гольдштейн С.Л. *778*

РАСЧЕТ ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПРОМЫШЛЕННЫХ СОЛЕЙ
Лаптев Р.А., Комарова В.А., Козлов Н.В., Черепанов А.Н. *781*

IP-ЯДРО АППАРАТНОГО УМНОЖИТЕЛЯ ЦЕЛЫХ ЧИСЕЛ ДЛЯ СБИС ФУНКЦИОНАЛЬНО-ОРИЕНТИРОВАННОГО ПРОЦЕССОРА
Лисовский Д.А., Лукин Н.А., Гусев А.В. *783*

РАСПРЕДЕЛЕННАЯ СРЕДА ПРОЕКТИРОВАНИЯ ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ОБОРУДОВАНИЯ НА БАЗЕ ОТЕЧЕСТВЕННОГО ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ
Огородников А.И. *786*

РАВНОВЕСНЫЕ И КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ РЕЖИМЫ В АВТОКАТАЛИТИЧЕСКОМ РЕАКТОРЕ СО СЛУЧАЙНЫМ ВОЗМУЩЕНИЕМ
Павлецов М.М., Перевалова Т.В. *788*

УТОЧНЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТОВ НЕЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ МЕТОДОМ ЛЕВЕНБЕРГА-МАРКВАРДТА
Петухова В. В., Огородников А. И. *790*

ПРИМЕНЕНИЕ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ В ИЗУЧЕНИИ МЕХАНИЗМОВ ПЛАВЛЕНИЯ НАНОКРИСТАЛЛОВ ДИОКСИДА УРАНА
Некрасов К.А., Пицхелаури С.С. *792*

РАЗВИТИЕ СПОСОБА ОЦЕНИВАНИЯ АНАЛОГОВ ПРИ НАЛИЧИИ ПАТЕНТНЫХ ОПИСАНИЙ
Гольдштейн С.Л., Кудрявцев А.Г., Ранцева Н.С. *794*

АНАЛИЗ МЕТОДОВ ВЫЧИСЛЕНИЯ СОПРОТИВЛЕНИЯ ПЕРФОРИРОВАННОЙ ПОВЕРХНОСТИ ПАРОГЕНЕРАТОРОВ
Бессонов И. А., Ревякина П. А., Ташлыков О. Л., Лезов А.Д. *795*

ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕМАТИКИ СТЕНКИ ЛЕВОГО ЖЕЛУДОЧКА В ТЕЧЕНИЕ СЕРДЕЧНОГО ЦИКЛА В НОРМЕ И ПРИ ПАТОЛОГИИ МЕТОДАМИ СТАТИСТИЧЕСКОГО АНАЛИЗА ФОРМЫ
Рокеах Р.О., Чумарная Т.В., Зубарев С.В. , Соловьёва О.Э. *797*

СИСТЕМА ОПТИМАЛЬНОГО УПРАВЛЕНИЯ РЕЖИМАМИ РАБОТЫ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СЕТЕЙ СРЕДНЕГО НАПРЯЖЕНИЯ
Рохлов В.А. *800*

ОБ АНАЛИЗЕ ПАТЕНТОВ НА СПОСОБЫ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ И ДИАГНОСТИКИ ИНФЕКЦИИ В ХИРУРГИИ
Гольдштейн С.Л., Кудрявцев А.Г., Рыбина Е.А. *802*

ИМИТАЦИОННАЯ ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА ПО ИЗУЧЕНИЮ РАДИАЦИОННО-ЗАЩИТНЫХ СВОЙСТВ МАТЕРИАЛОВ
Самбурских Д.С., Гречишкин Р.О., Аладаилах М.В., Ташлыков О.Л., Климова В.А. *804*

РАЗМЕТКА ВИДЕОДАННЫХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КРАУДСОРСИНГА ДЛЯ ЗАДАЧИ ДЕТЕКТИРОВАНИЯ
Шека А.С. *806*

ИССЛЕДОВАНИЕ НЕПРЕРЫВНОСТИ СТРУКТУРНОЙ СЛОЖНОСТИ НА ПРИМЕРЕ ДВУМЕРНЫХ ИЗОБРАЖЕНИЙ
Соломеин А.В., Кашин И.В. *808*

ОЦЕНКА ЭФФЕКТИВНОСТИ ЛЕДОВОГО КОНДЕНСАТОРА В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ЕГО ГЕОМЕТРИЧЕСКОЙ КОНФИГУРАЦИИ
Та Ван Тхыонг, Бессонов И.А., Бреусова А.А., Ревякина П.А., Чалпанов С.В., Ташлыков О.Л. *810*

АНАЛИЗ ДЛИН СЛОВ В ТЕКСТАХ ПУБЛИЧНЫХ ВЫСТУПЛЕНИЙ
Цижмовска Н.Л., Мартюшев Л.М. *812*

ОПТИМИЗАЦИЯ ПРОЦЕССА ЗАМЕНЫ МОДУЛЕЙ ПАРОГЕНЕРАТОРА ПГН-200М ПРИ ПОМОЩИ 3D-МОДЕЛИРОВАНИЯ

Завадский Д. И., Ташлыков О. Л. *814*

СЕКЦИЯ 7. БИОИНЖЕНЕРИЯ И БИОТЕХНОЛОГИИ

ПОЛУЧЕНИЕ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СЫРОВ С ИНКАПСУЛИРОВАННЫМ РЕСВЕРАТРОЛОМ И РЕСВЕРАТРОЛОМ В ТРАДИЦИОННОЙ ФОРМЕ

Аккузина Е.П., Камель М.М., Ковалева Е. Г. *818*

МАГНИТНЫЕ ФЛОКУЛЯНТЫ НА ОСНОВЕ НАНОЧАСТИЦ Fe_3O_4 И ЦИТРУСОВОГО ПЕКТИНА И АНИОННОГО СОПОЛИМЕРА АКРИЛАМИДА С АКРИЛАТОМ НАТРИЯ

Алексеева А.А., Константинова М.А., Миронкина А.С., Никонорова Д.А. *820*

СОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ МОДЕЛИ ПЕРЕМЕННОГО КОЭФФИЦИЕНТА ЖЁСТКОСТИ ДЛЯ АНАЛИЗА ПРОЧНОСТНОГО ПРЕДЕЛА БРОНХИАЛЬНОГО АНАСТОМОЗА

Андреева С.Ю., Соловьева С.Н. *822*

MONOCLONAL ANTIBODIES: DEVELOPMENT PROSPECTS

Anosike G. C., Ivantsova M.N. *825*

MEDICAL DATA AUGMENTATION GENERATOR BASED ON GIVEN FILE FOR RESEARCH PURPOSES

Aristova E.V., Smirnov A.A. *827*

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ БИОСОВМЕСТИМЫХ ПЕРОВСКИТНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК

Асабин Д.А., Романова Д.С., Новикова С.А., Грибова Е.Д. *828*

PHYSICOCHEMICAL PROPERTIES OF FERMENTED SOYMILK WITH ADDITION OF XANTHAN GUM

Asase R.V., Selezneva I.S., Glukhareva T.V. *830*

ПОИСК ОПТИМАЛЬНЫХ ПУТЕЙ ИЗВЛЕЧЕНИЕ БАВ ИЗ ВЫСУШЕННЫХ ЛИСТЬЕВ MORINGA OLEIFERA

Беккулова Р.Ф. *832*

МОБИЛЬНАЯ РАДИОМЕТРИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ДЛЯ РУЧНОГО ДИНАМИЧЕСКОГО И СТАТИЧЕСКОГО СКАНИРОВАНИЯ

Бочкарев Ю.А., Хохлов К.О., Панкин В.В. *835*

МОДЕЛИ РЕГУЛЯЦИИ ТРАНСПОРТА ИОНОВ В КЛЕТКАХ ЖИВОТНЫХ
Бондарь В.В., Мелких А.В. *837*

РАЗРАБОТКА АЛГОРИТМА ПОДАВЛЕНИЯ ТЕНЕЙ ОТ РЕБЕР И КЛЮЧИЦ НА ФЛЮОРОГРАФИЧЕСКИХ СНИМКАХ С ПРИМЕНЕНИЕМ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ
Чечулина М.Ю., Смирнов А.А. *839*

ЛОКАЛИЗАЦИЯ ПОВЕРХНОСТНЫХ ЭЛЕКТРОДОВ НА МИОКАРДЕ ПРИ ОТКРЫТОЙ ОПЕРАЦИИ НА СЕРДЦЕ ПРИ ПОМОЩИ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ
Чернобровкин Т.В., Курсанов А.Г. *840*

РАЗРАБОТКА ФУНКЦИОНАЛЬНОГО ПРОДУКТА ДЛЯ ПРОФИЛАКТИЧЕСКОГО ПИТАНИЯ ШАХТЕРОВ
Черногузова Д.С., Журавлева Д.А., Селезнева И.С. *842*

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКЦИИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ СОСТАВА МОЧЕВЫХ КОНКРЕМЕНТОВ
Чукина А.А., Денисова О.В. *844*

COMPARISON RESEARCH OF THE ANTIOXIDANT ACTIVITY OF RAW COCOA BEANS AND PROCESSED COCOA POWDER FROM DIFFERENT MANUFACTURING COMPANIES IN GHANA
Danyo E.K., Selezneva I.S. *846*

МОДЕЛИРОВАНИЕ ИММУНОДЕФИЦИТНОГО СОСТОЯНИЯ НА МОДЕЛЯХ ЛАБОРАТОРНЫХ ЖИВОТНЫХ (МЫШЕЙ)
Демичева Е.И., Поланко Ф.Е., Ушенин К.С., Соловьева О.Э. *848*

КУЛЬТИВИРОВАНИЕ FUSARIUM VERTICILLOIDES С ЦЕЛЬЮ БИОСИНТЕЗА ГИББЕРЕЛЛИНОВ
Дернина Д.Д., Журавлева Д.А., Глухарева Т.В. *849*

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ПОИСКА ПЕРОВСКИТОПОДОБНЫХ СОЕДИНЕНИЙ С НАИЛУЧШЕЙ ЭФФЕКТИВНОСТЬЮ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ СОЛНЕЧНОЙ ЭНЕРГИИ
Федотова Е.В., Смирнов А.А., Новоселов И.Э. *851*

СТАТИЧЕСКИЕ И ДИНАМИЧЕСКИЕ ФАНТОМЫ ДЛЯ КАЛИБРОВКИ МОБИЛЬНЫХ МЕДИЦИНСКИХ ИЗМЕРИТЕЛЬНЫХ КОМПЛЕКСОВ РАДИОМЕТРИИ
Гасилова Е.К., Вазиров Р.А., Панкин В.В. *853*

HERPES SIMPLEX VIRUS
Ivantsova M.N., Selezneva I.S. 855

РАЗРАБОТКА БИОСЕНСОРА ДЛЯ РЕГИСТРАЦИИ ФОСФОРОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ
Изможерова К.Д., Крюкова Е.М., Мезенина С.А., Чувашов Р.Д., Баранова А.А., Хохлов К.О., Вербицкий Е.В. 857

FUNCTIONAL PROPERTIES OF OVEN AND VACUUM DRIED CHLORELLA VULGARIS PROTEIN ISOLATES
Kambele J., Okechukwu Q.N., Kovaleva E.G. 859

ОБОЛОЧЕЧНАЯ МОДЕЛЬ МЕХАНИЧЕСКОГО КОНТАКТА СКЛЕРА-СЕТЧАТКА В РАМКАХ МЕТОДА КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ
Бунтов Е.А., Кокусов И.И., Соловьева С.Н. 861

О ДЕФОРМАЦИОННОМ ПОВЕДЕНИИ БИОМИНЕРАЛА (СКОРЛУПЫ ПТИЧЬИХ ЯИЦ) И МАТЕРИАЛОВ НА ЕГО ОСНОВЕ
Коровин Р.Д., Меженов М.Е., Кабанова А.Н., Мещерягина С.Г., Зайцев Д.В., Панфилов П. 863

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК АГАРОЗНОГО ГИДРОГЕЛЯ В КАЧЕСТВЕ КАРКАСА ДЛЯ ФЛУОРЕСЦЕНТНОГО БИОСЕНСОРА
Крюкова Е.М., Мезенина С.А., Изможерова К.Д., Чувашов Р.Д., Баранова А.А., Хохлов К.О., Вербицкий Е.В. 865

ВЛИЯНИЕ ИОНИЗИРУЮЩЕГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА СВОЙСТВА КАРТОФЕЛЬНОГО И КУКУРУЗНОГО КРАХМАЛА
Крылова Д.А., Косульникова С.А., Бажукова И.Н. 867

АНТИБАКТЕРИАЛЬНАЯ АКТИВНОСТЬ УГЛЕРОДСОДЕРЖАЩИХ ПОКРЫТИЙ
Лапина П.К., Городничий Е.К., Бажукова И.Н., Викторов Л.В. 869

РАЗРАБОТКА МЕТОДИКИ ВЫДЕЛЕНИЯ ПЕРИТУБУЛЯРНЫХ МИОДНЫХ КЛЕТОК ИЗ СЕМЕННИКОВ КРЫСЫ С ЦЕЛЬЮ ПОЛУЧЕНИЯ ПЕРВИЧНОЙ КУЛЬТУРЫ
Лейберова А.К., Хрипкова В.В., Храмцова Ю.С. 871

МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СКЛЕРОЗИРОВАННОГО ДЕНТИНА
Лоскутников Е.В., Куклина А.А., Зайцев Д.В. 873

ВЛИЯНИЕ НЕНЬЮТОНОВСКИХ СВОЙСТВ КРОВИ НА ОБРАЗОВАНИЕ РЕЦИРКУЛЯЦИОННЫХ ЗОН В СОСУДАХ СО СТЕНОЗОМ
Махаева К.Е., Соколов С.Ю., Бляхман Ф.А., Стародумов И.О. 875

FABRICATION OF FUCOIDAN/CHITOSAN NANOPARTICLES FOR THE CONTROLLED RELEASE OF PIPERINE IN VITRO
Mensah E.O., Mironov M.A. *878*

ВКЛЮЧЕНИЕ МАГНИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ В МЕЗОПОРИСТЫЕ МАТРИЦЫ КАРБОНАТА КАЛЬЦИЯ, ПРЕДНАЗНАЧЕННЫЕ ДЛЯ БИОМЕДИЦИНСКИХ ПРИМЕНЕНИЙ
Михеев А.В., Паллаева Т.Н., Бурмистров И.А., Артемов В.В., Хмеленин Д.Н., Трушина Д.Б. *880*

ВЛИЯНИЕ ДОПИРОВАНИЯ НАНОЧАСТИЦ ДИОКСИДА ЦЕРИЯ ИОНАМИ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ НА ПРОЯВЛЯЕМУЮ ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКУЮ АКТИВНОСТЬ
Муллаярова А.Р., Бажукова И.Н. *882*

ОЦЕНКА МОРФОФИЗИОЛОГИСЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПШЕНИЦЫ ПОД ДЕЙСТВИЕМ НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО ИОНИЗИРУЮЩЕГО ИЗЛУЧЕНИЯ
Нархова А.А., Вазиров Р.А., Звездакова Т.Н. *884*

ИЗВЛЕЧЕНИЕ ПРИЗНАКОВ И КЛАССИФИКАЦИЯ МЕДИЦИНСКИХ ИЗОБРАЖЕНИЙ С ПОМОЩЬЮ PYRADIOMICS И МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ
Новоселов И.Э., Смирнов А.А. *886*

ФАКТОРЫ РИСКА, ВЛИЯЮЩИЕ НА ВЫЖИВАЕМОСТЬ ПАЦИЕНТОВ С РАКОМ МОЧЕВОГО ПУЗЫРЯ
Огородникова С.Ю., Магер В.О., Константинова Е.Д., Вараксин А.Н., Анцыгин И.Н. ... *888*

NATURAL ADDITIVES IN BEER
Osei E., Ivantsova M.N. *891*

THE USE OF MICROWAVE RADIATION FOR CHILDREN'S FERMENTED MILK PRODUCTS
Panin M.V., Alkhateeb M-Kamal, Geide I.V., Selezneva I.S. *893*

ФОРМИРОВАНИЕ ДВУМЕРНЫХ ПАТТЕРНОВ В РЕАКЦИИ ГЛИКОЛИЗА
Панкратов А.А. *895*

ОЦЕНКА СБАЛАНСИРОВАННОСТИ СУТОЧНОГО РАЦИОНА ВЕГАНОВ ПО ПИЩЕВОЙ ЦЕННОСТИ
Перминова А.А. *897*

A COMPARISON OF THREE METHODS FOR MARKERS SELECTION IN UNTARGETED LIPIDOMICS

Polanco Espino F.J., Demicheva E.I., Ushenin K.S., Solovyova O.E. *898*

БАРООБРАБОТКА КАК ФАКТОР СТИМУЛЯЦИИ ПРОРАСТАНИЯ СЕМЯН САЛАТА

Процив С.Д., Кругликов Н.А., Беляев А.Ю., Быструшкин А.В. *900*

ВЛИЯНИЕ РАДИАЦИОННОЙ ОБРАБОТКИ НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИМ ЭЛЕКТРОННЫМ ПУЧКОМ НА СВОЙСТВА КРАХМАЛА И РЕДУЦИРУЮЩИХ САХАРОВ ПШЕНИЦЫ

Пустотина А.А., Вазиров Р.А. *902*

РАЗРАБОТКА МЕТОДИКИ ОЦЕНКИ ЖИЗНЕСПОСОБНОСТИ МИКРООРГАНИЗМОВ ТУРБИДИМЕТРИЧЕСКИМ МЕТОДОМ

Сабанин К.И., Чернов С.О., Бажукова И.Н., Прокопьева О.Е. *904*

СРАВНИТЕЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ И ОРГАНОЛЕПТИЧЕСКИХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ ЯИЦ ПТИЦЫ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ ЭЛЕКТРОННЫМ ПУЧКОМ ВЫСОКОЙ И НИЗКОЙ ЭНЕРГИИ

Сафронова А.В., Вазиров Р.А. *906*

ОЦЕНКА ПРОТЕОЛИТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ ЙОГУРТОВЫХ КУЛЬТУР

Савлукова Ю.О., Тихонов С.Л., Ковалева Е.Г. *908*

ОБРАБОТКА СЕМЯН УКРОПА ГИДРОСТАТИЧЕСКИМ ДАВЛЕНИЕМ И ВОЗДЕЙСТВИЕ ЭТОГО ФАКТОРА НА ПРОРАСТАНИЕ СЕМЯН И ДАЛЬНЕЙШЕЕ РАЗВИТИЕ ПРОРОСТКОВ

Шаваров С.Ю., Кругликов Н.А. *910*

РОСТ МЕЗЕНХИМАЛЬНЫХ СТВОЛОВЫХ КЛЕТОК НА ПОВЕРХНОСТИ МАГНИТНЫХ КОНДУИТОВ ДЛЯ ИНЖЕНЕРИИ НЕРВНОЙ ТКАНИ В ПЕРЕМЕННОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Шлапакова Л.Е., Сурменева М.А., Сурменев Р.А. *912*

СТОХАСТИЧЕСКАЯ ДИНАМИКА БЕЛКОВ RAB5/RAB7 В ЭНДОСОМАХ ПОД ВЛИЯНИЕМ МУЛЬТИПЛИКАТИВНЫХ ШУМОВ

Шолохов В. Д., Маковеева Е. В. *915*

ВЛИЯНИЕ РН СРЕДЫ НА МУЛЬТИФЕРМЕНТАТИВНУЮ АКТИВНОСТЬ ДИОКСИДА ЦЕРИЯ

Смольникова Е.Н., Бажукова И.Н., Мышкина А.В. *917*

ВЛИЯНИЕ АМИНОКИСЛОТ НА КРИСТАЛЛИЗАЦИЮ ЖЕЛЧНЫХ КАМНЕЙ В УСЛОВИЯХ, ПРИБЛИЖЕННЫХ К ЧЕЛОВЕЧЕСКОМУ ОРГАНИЗМУ
Степанова А. А., Панова Т. В. *919*

РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ СОЗДАНИЯ СОЛНЕЧНЫХ БАТАРЕЙ, СЕНСИБИЛИЗИРОВАННЫХ ОРГАНИЧЕСКИМИ КРАСИТЕЛЯМИ
Таланкина Л.М., Аюпова А.В., Низамова А.Р., Демина Н.С., Бажукова И.Н. *921*

ВЫЯВЛЕНИЕ НАРУШЕНИЙ ГОЛОСА С ПРИМЕНЕНИЕМ ТЕХНОЛОГИЙ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ
Целищева А.В., Смирнов А.А. *923*

ВОЗМОЖНОСТИ ПРИМЕНЕНИЯ ИОНИЗИРУЮЩЕГО ИЗЛУЧЕНИЯ В КОСМЕТОЛОГИИ НА ПРИМЕРЕ СКРАБОВ
Ужнева В.А., Баранова А.А. *924*

ОПТИМИЗАЦИЯ ПЛАНИРОВАНИЯ ДИСТАНЦИОННОЙ ЛУЧЕВОЙ ТЕРАПИИ С ПОМОЩЬЮ ФУНКЦИИ GEUD
Вечтомова А.Д., Баянкин С.Н. *926*

BIOLOGICALLY ACTIVE SUBSTANCES FROM MICROORGANISMS
Ibn-Wuni I., Ivantsova M.N. *928*

ЙОГУРТ С МНОГОКОМПОНЕНТНОЙ РАСТИТЕЛЬНОЙ ДОБАВКОЙ
Журавлева Д.А., Селезнева И.С. *930*

СЕКЦИЯ 8. ИННОВАЦИИ И СОЦИАЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

ИССЛЕДОВАНИЕ РОЛЕВЫХ МОДЕЛЕЙ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ВУЗА И ИНДУСТРИАЛЬНОГО ПАРТНЕРА В СФЕРЕ ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОЙ СОБСТВЕННОСТИ
Александрова А.С. *933*

УЧЕТ КОГНИТИВНЫХ ИСКАЖЕНИЙ В СИСТЕМЕ УПРАВЛЕНИЯ ИННОВАЦИЯМИ
Антонов П.С. *935*

МОТИВАЦИЯ ДОБРОВОЛЬЦЕВ В УСЛОВИЯХ ПРЕЕМСТВЕННОСТИ
Белов А.А. *937*

МОТИВАЦИЯ ВОЛОНТЕРОВ СОБЫТИЙНОГО ДОБРОВОЛЬЧЕСТВА
Белов А.А., Бондарева А.Ю. *939*

МОДЕЛЬ ИННОВАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В ЛОГИСТИЗАЦИИ
Давлетова Е.Э. 941

ОЦЕНКА ИННОВАЦИОННОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ НА ОСНОВЕ МЕЖДУНАРОДНЫХ СТАНДАРТОВ
Доманова М.Е. 943

ИНСТРУМЕНТАРИЙ ФОРМИРОВАНИЯ ИННОВАЦИОННОЙ СРЕДЫ ПРЕДПРИЯТИЙ ПО ТЕХНИЧЕСКОМУ ОБСЛУЖИВАНИЮ МЕДИЦИНСКОЙ ТЕХНИКИ
Дуйкова С.О. 945

ИННОВАЦИИ В ЭКОНОМИКЕ: КЛЮЧЕВЫЕ ДРАЙВЕРЫ И ВЫЗОВЫ
Гофман Д.Д., Павлов Е.С. 947

МЕТОДИКА ОЦЕНКИ ПРОЕКТНОЙ ЗРЕЛОСТИ КАК НЕПРЕРЫВНЫЙ ПРОЦЕСС СОВЕРШЕНСТВОВАНИЯ ОРГАНИЗАЦИИ
Хохлов Д.С. 950

АНАЛИЗ СТУДЕНЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ В СФЕРЕ ПАТРИОТИЧЕСКОГО ВОСПИТАНИЯ МОЛОДЕЖИ СОГЛАСНО КОНЦЕПЦИИ РОСПАТРИОТЦЕНТРА «10 ГРАНЕЙ ПАТРИОТИЗМА»
Колмогорова А.В., Канев М.Н., Белов А.А. 952

THE POLYCODE TEXTS DIDACTIC CAPABILITIES AND INNOVATIVE TECHNOLOGIES FOR THEIR IMPLEMENTATION
Krochin A.L., Spitsin S.E. 954

ФОРМИРОВАНИЕ УСЛОВИЙ ЦИФРОВОЙ ТРАНСФОРМАЦИИ СЕЛЬСКОГО ХОЗЯЙСТВА
Мешкова А.В. 956

МЕТОДИКА ПРОЕКЦИОННОГО КОНСТРУИРОВАНИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЭЛЕКТРОННОЙ 3D-СРЕДЫ «LIGROGAME» В ДОШКОЛЬНОМ ОБРАЗОВАНИИ
Молоднякова А.В. 958

ПАТЕНТНАЯ И ИННОВАЦИОННАЯ АКТИВНОСТЬ В РОССИИ: ЦИФРЫ И ПРОБЛЕМЫ
Павлов Е.С., Гофман Д.Д. 961

АНАЛИЗ НОРМАТИВНО-ПРАВОВОЙ БАЗЫ И РАЗРАБОТКА РЕКОМЕНДАЦИЙ ПО УЛУЧШЕНИЮ ТЕХНОЛОГИЙ БЛАГОУСТРОЙСТВА И СОДЕРЖАНИЯ ПРИДОМОВЫХ ТЕРРИТОРИЙ
Початкова Е.И., Селезнев А.А. 963

ОЦЕНКА КОМПЕТЕНТНОСТИ КОМАНДЫ УПРАВЛЕНИЯ ИННОВАЦИОННЫМИ ПРОЕКТАМИ В ИТ-СФЕРЕ
Попова А.П. *965*

ИННОВАЦИОННЫЙ МЕТОД УПРАВЛЕНИЯ КАДРАМИ: НЕСТАНДАРТНАЯ НЕМАТЕРИАЛЬНАЯ МОТИВАЦИЯ
Сабанцева Т. В., Таланкина А. К., Ладейщикова О. М., Мясникова Д. В. *967*

МОДЕЛЬ ДЛЯ ОЦЕНКИ ПОСТУПЛЕНИЯ ПЫЛЕГРЯЗЕВЫХ НАНОСОВ НА УРБАНИЗИРОВАННОЙ ТЕРРИТОРИИ
Шевченко А.В., Селезнев А.А., Ярмошенко И.В., Малиновский Г.П. *969*

ИННОВАЦИОННЫЙ МЕТОД ПРЕПОДАВАНИЯ МЕНЕДЖМЕНТА: ЛИТЕРАТУРНЫЕ БИЗНЕС-КЕЙСЫ
Емельянова Е.В., Мясникова Д.В., Штырёва Г.К. *971*

МЕТОДИКА ОЦЕНКИ КОНКУРЕНТОСПОСОБНОСТИ ИННОВАЦИОННЫХ ПРЕДПРИЯТИЙ
Вырыпаева Е.А. *973*

ЭФФЕКТИВНОСТЬ ВНЕДРЕНИЯ ЭКОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЕКТНЫХ МЕРОПРИЯТИЙ В ПРОМЫШЛЕННОСТИ
Ясашных Е.В. *974*

СЕРИЯ СОЦИОЛОГИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ ОТНОШЕНИЯ МОЛОДОГО ПОКОЛЕНИЯ К ИЗМЕНЕНИЯМ ТРУДОВОГО ЛАНДШАФТА В РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Зафиров Е.А., Иванова К.Л., Партов О.Р. *976*

СЕКЦИЯ 9. ЮНЫЕ ТАЛАНТЫ

ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ПАРАМЕТРОВ СИНТЕЗА ОКСИДА АЛЮМИНИЯ НА ЕГО УДЕЛЬНУЮ ПОВЕРХНОСТЬ
Могильникова Д.Д., Солодовникова П.А., Вострецова Д.А. *979*

ПАСПОРТИЗАЦИЯ КОПЕЙ ШАЙТАНСКОГО УЧАСТКА РЕЖЕВСКОГО ПРИРОДНО-МИНЕРАЛОГИЧЕСКОГО ЗАКАЗНИКА
Семенищев Я.В., Борич С.Э. *981*

ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ПАРАМЕТРОВ СИНТЕЗА ОКСИДА АЛЮМИНИЯ НА ЕГО ВЯЗКОСТЬ В СОСТАВЕ РАБОЧЕЙ СУСПЕНЗИИ
Вострецова Д.А., Солодовникова П.А., Могильникова Д.Д. *983*

СЕКЦИЯ 1

ЯДЕРНЫЕ И РАДИАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

ПЕРВОПРИНЦИПНОЕ ИЗУЧЕНИЕ ПОВЕДЕНИЯ ТРИТИЯ В РАСПЛАВЛЕННОЙ СОЛЕВОЙ СМЕСИ FLiBe

Анисимов А.Ф.[1], Воробьёв А.С.[1], Галашев А.Е.[1, 2]
[1)] Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: Dyhansky@mail.ru

FIRST-PRINCIPLE STUDY OF THE TRITIUM BEHAVIOR IN A FLiBe MOLTEN SALT MIXTURE

Anisimov A.F.[1], Vorob'ev A.S.[1], Galashev A. E.[1, 2]
[1)] The Institute of High Temperature Electrochemistry UB RAS, Yekaterinburg, Russia
[2)] Ural Federal University named after the First President of Russia B.N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia

This article presents the results of ab initio MD modeling and research of FLiBe molten salt at different temperatures and compositions. As a result, were obtained energetic characteristics of the system, made conclusions about the behavior of tritium and helium.

Применение жидких солей, в частности $LiF\text{-}BeF_2$, является перспективным направлением в развитии ядерной энергетики. Однако в условиях эксплуатации могут протекать процессы, результатами которых является появление в системе трития. Образование трития является проблемой как с точки зрения долговечности реактора, так и с точки зрения безопасности. Целью работы является изучение с использованием ab initio молекулярной динамики влияния трития на свойства расплавов $LiF\text{-}BeF_2$ в зависимости от температуры и количества трития в расплаве.

В данной работе моделировался расплав солей $LiF\text{-}BeF_2$ в соотношении 66:34% при температурах 873, 973 и 1073 K с добавлением в систему примесей трития и гелия. Было проведено первопринципное молекулярно-динамическое моделирование в термостате Нозе-Гувера [1] с использованием обобщенного градиентного приближения в форме PBE [2]. Длина расчёта составляла~1200 временных шагов, шаг моделирования составлял 1 фс. Динамическая релаксация атомов продолжалась до тех пор, пока изменение полной энергии системы не становилось меньше 0,001 эВ. Плотность трёхмерной сетки для расчёта электронной плотности задавалась с помощью энергии отсечки равной 400 Ry.

В результате были получены данные об эволюции систем, сделаны выводы о структурных и энергетических характеристиках. Показано, что замещение лития тритием в системе ведёт к уменьшению общих энергий связей. Получены данные о конфигурации ближайших координационных сфер элементов, входящих в состав исследуемых расплавленных солей. Показан возможный переход от $[BeF_4]^{2-}$ до $[BeF_3]^-$ при замещении лития тритием в системе. Установлено три

возможных состояния трития в рассматриваемой системе: TF и два соединения $[TF_2]^-$. Показана устойчивость всех обнаруженных конфигураций TFX. Обнаружен переход между конфигурациями соединения $[TF_2]^-$. Показан переход от соединения$[TF_2]^-$ к соединению TF. Выявлены отрицательные энергии связей TF и He с расплавом, что может говорить о выделении данных веществ из расплава в виде газовой фазы.

1. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M., Phys. Rev. Lett., V. 77, P. 3865, (1996)
2. Nose S. J., Chem. Phys., V. 81, P. 511, (1984)

МОДЕЛЬ ДИНАМИКИ СОДЕРЖАНИЯ 131-I В ЩИТОВИДНОЙ ЖЕЛЕЗЕ И СУТОЧНОМ УДОЕ МОЛОКА ДОЙНЫХ КОРОВ

Басова М.А.[1], Снегирёв А.С.[1], Козьмин Г.В.[1]
[1)] ФГБНУ ВНИИРАЭ, Обнинск, Россия
E-mail: maribasova97@mail.ru

DYNAMICS MODEL OF THE CONTENT 131-I IN THE THYROID AND DAILY MILK YIELD IN DAIRY COWS

Basova M.A.[1], Snegirev A.S.[1], Kozmin G.V.[1]
[1)] RIRAE, Obninsk, Russia

The model of radioiodine metabolism in the body of dairy cows, taking into account the content of stable iodine in the diet of animals, makes it possible to evaluate the effectiveness of the use of iodine preparations in order to reduce the accumulation of isotopes in the thyroid gland and milk.

Для прогноза состояния здоровья животных и оценки поступления радиоактивных изотопов йода в молочную цепочку человека была разработана камерная модель метаболизма радиойода в организме крупного рогатого скота, учитывающая содержание стабильного йода в рационе животных. Модель даёт возможность оценки эффективности использования в качестве противорадиационной меры препаратов стабильного йода в целях снижения накопления изотопов в щитовидной железе и молоке дойных коров.

Структуру камерной модели определяли на основе результатов экспериментальных исследований закономерностей метаболизма и обоснования транспортных коммуникаций нуклидов между функционально связанными органами и тканями. Оценку биокинетических параметров метаболизма радиойода у крупного рогатого скота проводили с использованием математического компартментального анализа, опубликованных экспериментальных данных и статистических критериев адекватности математического моделирования.

За основу модели, учитывающей влияние стабильного йода на накопление радиойода в щитовидной железе и молоке дойных коров была принята камерная модель, разработанная нами [1] на основе экспериментальных результатов [2].

С использованием опубликованных экспериментальных данных была решена обратная задача по оценке параметров перехода радиойода из циркулирующей крови в щитовидную железу и из крови в вымя. Путём перебора значений по заданной сетке величин были найдены такие значения, при которых в йододефицитных районах ($D \leq 20$ мг/сут) накопление ^{131}I в щитовидной железе превышало от 2 раз и более накопление радиойода в районах нормального содержания стабильного йода [3]. Также путём перебора были найдены значения,

при которых применение добавок стабильного йода позволяло добиться снижения содержания радиойода в ЩЖ более чем в 10 раз и снижение активности ^{131}I в молоке не менее чем в 1,3-2 раза. На основе анализа полученных результатов было принято:

$k_{34}=k_H\cdot(D_H)$, $D\leq 20$ мг/сут

$k_{34}=k_H$, $20<D<500$ мг/сут

$k_{34}=k_H\cdot(10\cdot D_H/D)$, $D\geq 20$ мг/сут

где D – содержание стабильного йода в рационе животных, мг/сут;

$D_H = 20$ мг/сут - норма стабильного йода в рационе животных, мг/сут.

k_H – константа скорости перехода радиойода из крови в щитовидной железе при $D_H = 20$ мг/сут.

Разработан алгоритм для расчёта динамики содержания ^{131}I в щитовидной железе и суточном удое молока дойных коров, в зависимости от содержания стабильного йода в рационе животных.

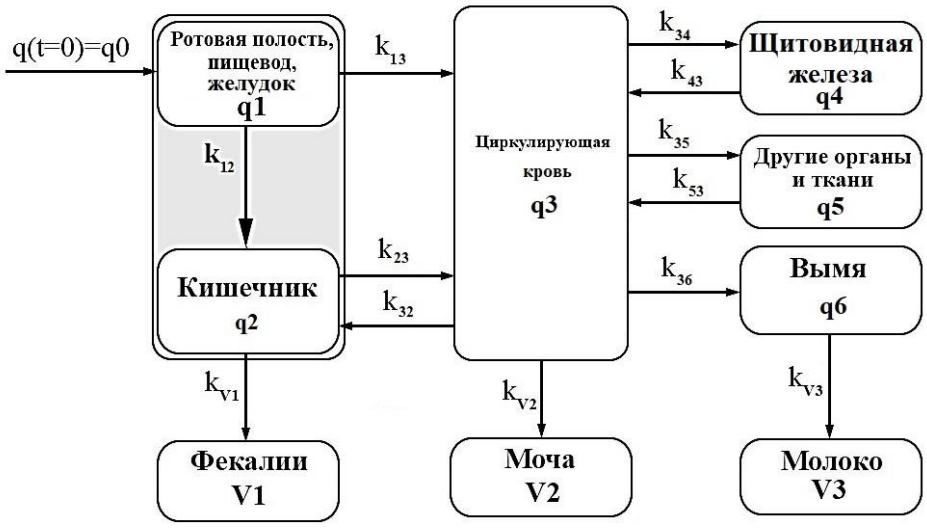


Рис. 1. Камерная модель метаболизма радионуклидов йода в организме дойных коров.

1. Снегирев А.С., Козьмин Г.В., Исамов Н.Н. с соавт. Матема-тическая модель метаболизма радионуклидов в организме коров // Экологическая, промышленная и энергетическая безопасность - 2017: Сборник статей по материалам научно-практической конференции с международным участием. Се-вастополь: Севастопольский государственный университет, 2017. С. 1255-1258.
2. Сироткин А.Н., Панченко И.Я., Тюменев Л.Н. с соавт. Срав-нительное поведение 131I у коров при различных источниках поступления его в организм // В сб. Биологическое действие внешних и внутренних источников радиации. М: Медицина. 1972. С. 72-77.
3. Радиобиология. Радиационная безопасность сельскохозяй-ственных животных / Под ред. В.А. Бударкова и А.С. Зенки-на. М.: БИБКОМ. 2017. 440 с.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАЩИТНЫХ СВОЙСТВ ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИТОВ С ПУЦЦОЛАНОМ ОТ ГАММА-ИЗЛУЧЕНИЯ

Чалпанов С.В.[1], Бессонов И.А.[1], Бреусова А.А.[1], Ташлыков О.Л.[1], Аладаилах М.В.[1]

[1)] Уральский федеральный университет имени первого президента России Б. Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

E-mail: ChalpanovS@mail.ru

EXPERIMENTAL STUDY OF THE PROTECTIVE PROPERTIES OF POLYMER COMPOSITES WITH POZZOLAN AGAINST GAMMA RADIATION

Chalpanov S.V.[1], Bessonov I.A.[1], Breusova A.A.[1], Tashlykov O.L.[1], Aladailah M.W.[1]

[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia B. N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia

The article summarizes the results of an experimental study of polymer composite materials as radiation protection against gamma radiation, the filler of which is a mixture of volcanic ash, tuff and pumice.

Среди способов снижения облучаемости персонала (увеличение расстояния от источника до человека, уменьшение времени пребывания в радиационных полях, снижение мощности дозы излучения от источника) важную роль играет экранирование источника ионизирующего излучения. В настоящее время использование экранов ограничено небольшим выбором материалов, часто не обладающих удобством использования, что затрудняет их установку и снятие.

Для защиты от гамма-излучения и рентгеновского излучения применяют защитные экраны, наполнителем которых являются материалы с большим атомным номером и высокой плотностью (железо, свинец, вольфрам и т.д.).

В некоторых случаях для защиты (например, рентгеновских кабинетов) используют барит, как добавку в строительные материалы. Наилучшей защитной эффективностью среди традиционных материалов обладают вольфрам, свинец. Однако их стоимость весьма значительна.

В последние годы значительный интерес проявляется к поиску новых составов композитных радиационно-защитных материалов с использованием в качестве наполнителя местных пород, минералов и отходов промышленного производства в странах, где планируется сооружение объектов использования атомной энергии (ОИАЭ). Это связано с необходимостью минимизации затрат на сооружение биологической защиты ОИАЭ [1].

Одним из возможных эффективных защитных материалов могут быть полимерные композитных материалов (ПКМ), состоящие, например, из полиэтилена высокой плотности и содержащие различные концентрации наполнителей. В данной работе приведены результаты экспериментальных исследований ослабляющих свойств ПКМ, в которых наполнителем является пуццолан, представляющий собой горную породу из Иордании, состоящую из смеси мелкодисперсного вулканического туфа, пепла, пемзы. При проведении эксперимента использовались три вида источников гамма-излучения (Am-241, Cs-137 и Co-60), выбор которых обусловлен необходимостью измерения линейного коэффициента ослабления при различных спектрах энергий гамма-излучения.

В результате проведения исследований выявлено, что при увеличении концентрации пуццолана с 10% до 40% линейный коэффициент ослабления увеличивается на 148% при облучении гамма-излучением от изотопа Am-241; для Cs-137 увеличение составляет 23%; для Co-60 уменьшение составляет 26%.

1. Бормотов А.Н., Прошин А.П., Баженов Ю.М., Данилов Ю.М., Соколова Ю.А. Полимерные композиционные материалы для защиты от радиации: монография. – М.: Издательство «Палеолит», 2006. – 272 с.

ОЦЕНКА КРИТИЧЕСКОЙ ДОЗЫ ^{131}I В ЩИТОВИДНОЙ ЖЕЛЕЗЕ КРУПНОГО РОГАТОГО СКОТА

Денисова Э.Н.[1], Кураченко Ю.А.[2]
[1)] Курская атомная станция, Курчатов, Россия
[2)] ФГБНУ Всероссийский научно-исследовательский институт радиологии и агроэкологии, Обнинск, Россия
E-mail: ellaizaden@mail.ru

THE ESTIMATION OF A CRITICAL DOSE ^{131}I IN A CATTLE'S THYROID

Denisova E.N.[1], Kurachenko Yu.a.[2]
[1)] Kursk Nuclear Power Plant, Kurchatov, Russia
[2)] Russian Institute of Radiology and Agroecology, Obninsk, Russia

The relevance of this problem is determined by the practical necessity of a reliable prediction of the dose in the thyroid of irradiated animals in order to make a decision on their disposal or transfer to clean feed.

В настоящей работе предлагаются результаты исследования, посвящённого развитию, валидации и применению современных расчётных технологий для решения задач определения характеристик внутреннего облучения сельскохозяйственных животных после радиационных аварий.

Методологическую основу исследования составляют научные результаты, полученные при решении широкого круга задач транспорта излучений, реакторной физики, физики защиты, дозиметрии, радиационной терапии и др. [1-2], логическую последовательность выполнения которых, упрощенно, можно представить в виде схемы (Рисунок 1).

№	Размеры ЩЗ			
	Внешний радиус, см		Высота, см	
	Коровы	Телята	Коровы	Телята
1	3.15	2.15	1.50	1.50
2	3.40	2.30	2.00	2.00
3	3.55	2.40	2.20	2.20
4	3.20	2.15	1.50	1.50
5	2.70	1.65	1.00	0.50

R=2.4 см (коровы); R=1.4 см (телята)

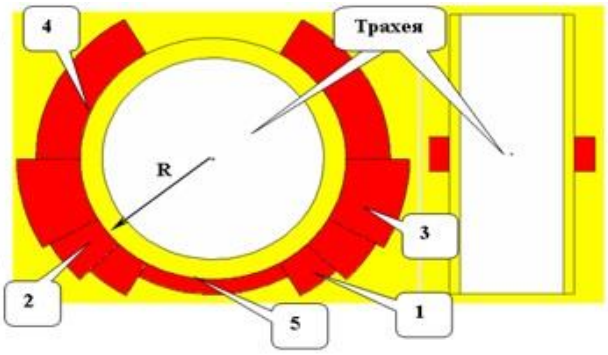


Рис. 1. Упрощённая схема решения задачи

В задачах, заявленных темой исследования, наибольшую трудность представляет адекватное описание источника излучений: в данном случае это метаболизм введённой активности в желудочно-кишечном тракте (ЖКТ).

Процесс метаболизма обычно описывается с помощью камерной модели, и качество описания определяет зачастую точность результата. Проблема транспорта излучений в нашем случае проще, чем в традиционных областях: оптические размеры биологических объектов составляют 5÷10 длин свободного пробега вместо 30÷50. Из этого следует, что задачи транспорта излучений в данном случае допускают использование прецизионных моделей переноса, прежде всего на основе метода стохастических испытаний (метода Монте-Карло).

В настоящее время эти методы в задачах радиационной медицины, радиобиологии и др. находятся вне конкуренции по сравнению с методами численного решения уравнения переноса, полуэмпирическими и инженерными методами.

Усовершенствование вычислительной технологии дает возможность для задач рассматриваемого класса отобразить в расчёте не только всю полноту научных знаний о конфигурации и материалах расчётной области, но и учесть с достаточной точностью все ядерно-физические процессы при транспорте излучений в веществе. Тем самым остаётся единственный источник возможной ошибки: это качество моделирования процесса метаболизма с помощью камерной модели ЖКТ.

1. Кураченко Ю.А. Реакторные пучки для лучевой терапии: Диссертация. - Обнинск, 2008.
2. Kurachenko Yu. A. Cattle’s Thyroid Dose Estimation with Compartmental Model of Iodine Metabolism and Monte Carlo Transport Technique / Kurachenko Yu. A., Sanzharova N.I., Kozmin G. V., Budarkov V. A., Denisova E. N., Snegirev A. S. // Medical radiology and radiation safety, 2018. – № 5. – p. 48-54.

ПОВЫШЕНИЕ ТОЧНОСТИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ИНДИВИДУАЛЬНОГО ЭКВИВАЛЕНТА ДОЗЫ $H_P(10)$

Гангур П.В.[1], Ташлыков О.Л.[2], Никитенко В.О.[1]
[1)] Белоярская АЭС, Заречный, Россия
[2)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: gangur97@mail.ru

IMPROVING THE ACCURACY OF DETERMINING THE INDIVIDUAL DOSE EQUIVALENT $H_P(10)$

Gangur P.V.[1], Tashlykov O.L.[2], Nikitenko V.O.[1]
[1)] Beloyarsk NPP, Zarechny, Russia
[2)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The article presents experimental studies to determine the human and industrial factors influencing the determination of the individual dose equivalent. As a result of the work done, corrective measures have been identified.

Автоматизированная система индивидуального дозиметрического контроля (АСИДК) «Harshaw 6600Lite» основана на принципе термолюминесцентной (ТЛ) дозиметрии. Результатом измерения дозиметрической карты ТЛ-дозиметра является площадь под кривой термовысвечивания, которая, в свою очередь, пропорциональна изначальной поглощенной дозе. При измерении мы получаем операционную величину – индивидуальный эквивалент дозы $H_P(10)$.

В процессе эксплуатации системы при проведении измерений были обнаружены частные случаи отклонения ожидаемой кривой термовысвечивания, которые не были прокомментированы в технической документации изготовителя оборудования. Вследствие этого различные искажения кривой термовысвечивания, полученной в результате процесса измерения, дополнительно вносили вклад в значение индивидуального эквивалента дозы $H_P(10)$.

Для исследования данного эффекта была произведена серия различных экспериментов, позволяющих определить производственные и человеческие факторы, влияющие на точность определения индивидуального эквивалента дозы $H_P(10)$.

Дополнительно в работе для сравнения результатов была использована система АСИДК отечественного производства «Корос-333», предоставленная в опытную эксплуатацию организацией АО «Уральский электромеханический завод».

В результате экспериментов были установлены причины, влияющие на отклонение кривой термовысвечивания. В АСИДК «Harshaw 6600Lite»

используется нагрев ТЛ-детектора до температур порядка 300 ºС, поэтому случайное попадание различных горючих сред на поверхность кристалла-детектора может привести к горению этих веществ, световое излучение которых попадет на регистрирующее устройство. Данный эффект может внести существенный вклад в значение дозы.

В других случаях существует влияние временного фактора при определении индивидуального эквивалента дозы $H_P(10)$. Исследуемый эффект характерен именно для использующегося кристалла-детектора LiF^6: Mg, Ti. Эффект заключается в рекомбинации носителей заряда, захваченных низкоэнергетическими ловушками, образованных при длительном или высокоинтенсивном облучении источником ионизирующего излучения.

Освобождение электронов с уровней захвата и перевод их в зону проводимости может происходить вследствие обычного теплового движения при комнатной температуре. Если произвести измерение дозиметров после непосредственного облучения, в нашем случае после дозозатратных работ, то на кривой термовысвечивания отразиться вклад дополнительных пиков, вызванных образованием низкоэнергетических уровней захватов электронов [1].

В результате проделанной работы были определены корректирующие мероприятия, позволяющие уменьшить влияние различных факторов при определении индивидуального эквивалента дозы $H_P(10)$.

Более точное определение индивидуального эквивалента дозы позволит в дальнейшем сформулировать и реализовать необходимые организационные мероприятия по минимизации обучаемости персонала, в соответствии с принципом ALARA.

1. Люминесценция твердых тел и релаксация электронных возбуждений : учеб. пособие / В.А. Пустоваров. – Екатеринбург : УГТУ– УПИ, 2003. 53 с

ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЛЯ ТЕМПЕРАТУР И ТЕПЛОВЫХ ПОТОКОВ В АКТИВНОЙ ЗОНЕ ЯДЕРНОГО РЕАКТОРА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ТОРИЕВОГО ТОПЛИВА

Гоглачев А.В.[1], Мясникова В.А.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: Alex.V.Goglachev@urfu.ru

RESEARCH OF THE FIELD OF TEMPERATURES AND HEAT FLOWS IN THE CORE OF A NUCLEAR REACTOR USING THORIUM FUEL

Goglachev A.V.[1], Myasnikova V.A.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Interest in thorium nuclear fuel is based on its availability, improved neutronic characteristics, longer campaigns of nuclear reactors, higher fuel burnup and reprocessing of spent nuclear fuel in order to create a closed fuel cycle.

Внедрение ториевого топливного цикла в ядерную энергетику может сыграть главенствующую роль в энерговооруженности страны, обеспечить доступность основных материалов для получения энергии ядерного деления. Интерес к топливу на основе тория основан на его доступности, улучшенных нейтронно-физических характеристиках, более длительных кампаниях ядерных реакторов, более высокой степени выгорания топлива и, как следствие, переработке отработанного ядерного топлива с целью создания замкнутого топливного цикла.

Целью нашего исследования является изучение поля температур и тепловых потоков в активной зоне ядерного реактора с ториевым топливом. В ходе исследования планируется провести тепловой расчет активной зоны и определить основные теплотехнические параметры при неизменной конструкции и мощности реактора, при замене в топливе изотопа уран-238 на торий-232.

При работе реактора в его объеме активной зоны происходят физические процессы, характеризующиеся пространственным распределением плотности потока нейтронов, скоростей ядерных реакции, тепловыделения, температуры.

Пространственно-энергетическое распределение нейтронов обусловливает распределение по объему реактора скоростей ядерных реакций, которые задают распределение источников внутриреакторного излучения и тепловыделения в материалах и элементах реактора.

Пространственное распределение скоростей ядерных реакций под действием нейтронов приводит также к неравномерному выгоранию топлива и наработке новых нуклидов в реакторе. Взаимодействие же реакторного излучения с веществом наряду с тепловыделением вызывает радиационные повреждения

материалов, изменяя их физико-механические и теплофизические характеристики. При отводе тепла, выделяющегося в реакторе при его работе на номинальной мощности, формируются поля температур, обусловленные распределением тепловыделения, расходов теплоносителя и характеристиками теплоотводящих материалов.

Пространственные распределения перечисленных параметров с учетом условий обеспечения работоспособности элементов реактора определяют выходные и заданные показатели последнего. Требования к обеспечению работоспособности элементов реактора приводят к ограничениям на значения некоторых характеристик реактора.

Характеристики, определяющие физические процессы, которые происходят в реакторе, и ограничивающие работоспособность его элементов, как правило, неравномерно распределены как по элементам реактора, так и в пределах этих элементов.

Эти неравномерности существенно влияют на выходные показатели реактора, в связи с чем при проектировании и оптимизации реактора их необходимо учитывать и воздействовать на них с целью улучшения показателей реактора.

В ходе исследования были установлены значения температуры теплоносителя по высоте активной зоны, наружной поверхности оболочки ТВЭЛ и топливного сердечника, проведено сравнение полученных данных со значениями действующих реакторов для установления возможности использования тория в реакторах без изменения его конструкции.

1. Касьян А. И., Хамидуллин Р. Я. Перспективыториевого цикла. Часть 1, 2. Двигатель, 2012, № 1, №2.
2. Nelson A. T. Thorium: Not a near-term commercial nuclear fuel / Bulletin of the Atomic Scientists: journal. 2012. Vol. 68, no. 5.

ПОЛИЭТИЛЕН ВЫСОКОЙ ПЛОТНОСТИ, НАПОЛНЕННЫЙ ПУЦЦОЛАНОЙ, КАК МАТЕРИАЛ ПОЛИМЕРНОЙ РАДИАЦИОННОЙ ЗАЩИТЫ

Гречишкин Р.О.[1], Самбурских Д.С.[1], Аладаилах М.В.[1], Ташлыков О.Л.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: roman90658@gmail.com

HIGH DENSITY POLYETHYLENE FILLED WITH POZZOLANA AS A POLYMER RADIATION PROTECTION MATERIAL

Grechishkin R.O.[1], Samburskikh D.S.[1], Aladailah M.W.[1], Tashlykov O.L.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The radiation-protective properties of polymer composite materials based on high-density polyethylene with a filler made of natural pozzolana, as well as a binding agent in the form of vinyltrimethoxysilane were studied in this study.

Тенденция к увеличению числа объектов народного хозяйства, использующих источники ионизирующего излучения, все больше актуализирует проблему защиты персонала и окружающей среды от влияния радиоактивных источников и требует разработки новых эффективных строительных материалов, предназначенных для защиты от радиации в течение продолжительного периода [1]. У большинства металлов при сильном облучении увеличивается склонность к коррозии, хрупкости, также возникают и другие неблагоприятные. Перспективными материалами могут выступать полимеры [2].

В настоящее время полимерные композиционные материалы всё больше находят применение в области радиационной защиты. Данная тенденция связана с многообразием полимеров и наполнителей, неисчерпаемой возможностью комбинаций составов композитов на их основе и методов их модификации.

В работе рассмотрено изготовление полимерных радиационно-защитных материалов (РЗМ) на основе полиэтилена высокой плотности (HDPE) с гибридным наполнителем из натуральной пуццоланы (NP), муки из оливковых выжимок (OPF) и связующего агента (CA) - винилтриметоксисилана. Природные пуццоланы обычно являются материалами вулканического происхождения или осадочными породами, главным образом, состоят из диоксида кремния, оксида алюминия и оксида железа и других оксидов. Месторождения пуццолан распространены по всему миру [3]. Состав природных пуццолан и их распространенность вызывают интерес для исследования использования данного материала в качестве радиационной защиты.

Исследования проводились в Уральском федеральном университете на образцах, изготовленных в университете Al Albayt University (Иордания).

Для определения массовых коэффициентов ослабления излучения была использована база данных NIST XCOM.

1. Машкович В. П., Кудрявцева А. В. Защита от ионизирующих излучений — Москва : Энергоатомиздат, (1995) — 450 с.
2. Горячева К.В., Очкина Н.А. / Композиционные материалы для защиты от радиации — // Энергетика: Эффективность, Надежность, Безопасность. — Томск : (2015) — С. 260-262.
3. Добавки в бетон: Справ. пособие / В. С. Рамачндран, Р. Ф. Фельдман, М. Коллепарди и др.; Под ред. В. С. Рамачандрана; Пер с англ. Т. И. Розеберг и С. А. Болдырев; Под ред. А. С. Болдырева и В. Б. Ратинова. – М.: Стройиздат, (1988) – 575

НЕКОТОРЫЕ АСПЕКТЫ ГИДРОДИНАМИКИ ДВУХФАЗНОГО ПОТОКА В ТЕПЛООБМЕННОЙ ТРУБКЕ ВЫПАРНОГО ПЛЕНОЧНОГО АППАРАТА, ПРЕДНАЗНАЧЕННОГО ДЛЯ КОНЦЕНТРИРОВАНИЯ ВАО

Гушшамова В.Н.[1], Хомяков А.П.[1], Морданов С.В.[1], Хомякова Т.В.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
E-mail: 89126634949@yandex.ru

SOME ASPECTS OF THE TWO-PHASE FLOW HYDRODYNAMICS IN THE HEAT EXCHANGE TUBE OF THE FALLING-FILM EVAPORATOR DESIGNED FOR THE HLW CONCENTRATION

Gushshamova V.N.[1], Khomyakov A.P.[1], Mordanov S.V.[1], Khomyakova T.V.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The article presents the results of mathematical modeling of the hydrodynamics of the two-phase flow in a heat exchange tube of the falling-film evaporator, which was used to evaporate the HLW solution - simulator.

Выпаривание является одним из наиболее эффективных способов очистки жидких радиоактивных отходов (ЖРО) от растворимых солей. Как правило, данный процесс реализуется в выпарных аппаратах с естественной циркуляцией [1-3]. В настоящее время существует тенденция применения пленочных выпарных аппаратов для концентрирования высокоактивных отходов [4]. Однако, данные о гидродинамике двухфазного потока в теплообменной трубке пленочного аппарата, применительно к концентрированию ВАО, отсутствуют.

Целью данной работы является исследование гидродинамики двухфазного потока в теплообменной трубке выпарного аппарата с падающей пленкой, который предназначен для концентрирования высокоактивных отходов.

Исследование гидродинамики проводилось с помощью математического численного моделирования для вертикального выпарного аппарата пленочного типа с теплопередающей поверхностью 0,5 м^2, оснащенного теплообменной трубой (диаметром ø38х3 мм и длиной L=4 м). Данные были получены по длине теплообменной трубы с шагом ΔL_i=0,2 м.

Математическое моделирование проводилось для условий упаривания раствора-имитатора на вертикальном выпарном аппарате пленочного типа: интенсивность орошения нагревательной трубки составляла от 398 до 637 кг/(м·ч), температура исходного раствора 70°С, значение давления греющего пара в диапазоне от 0,19 до 0,21 МПа и расход 81 кг/ч.

Получены распределение локальных значений массового расхода исходного раствора (рис.1), массового расхода вторичного пара, скорости вторичного пара, абсолютного давления по длине теплообменной трубки.

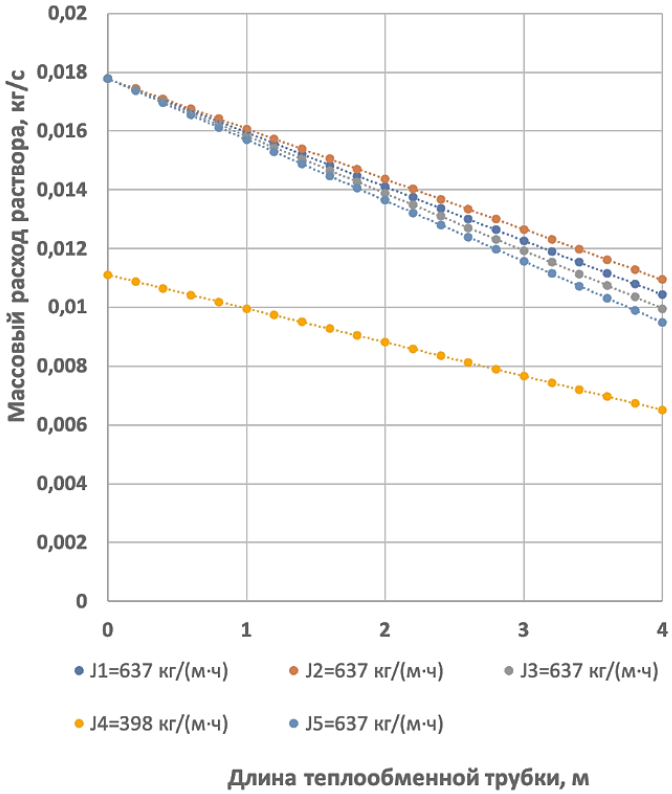


Рис. 1. Распределение локальных значений массового расхода исходного раствора по длине теплообменной трубки в зависимости от различных технологических режимов работы аппарата

По результатам математического моделирования установлены режимы, наиболее благоприятные для концентрирования ВАО.

1. Скачек, М.А. Обращение с отработавшим ядерным топливом и радиоактивными отходами АЭС: учебное пособие для студентов вузов, обучающихся по специальности "Атомные электрические станции и установки" направления подготовки "Техническая физика" / М. А. Скачек. - Москва: Изд. дом МЭИ, 2007. – 447 с.
2. Кузнецов Ю.В. Основы очистки воды от радиоактивных загрязнений / Кузнецов Ю.В., Щебетковский В.Н., Трусов А.Г. - М.: Атомиздат, 1974.
3. Novoselov I. K., Two-phase flow hydrodynamics research in the LWR ozonation contact apparatus / I. K. Novoselov, A. P. Khomyakov, S. V. Mordanov, V. A. Nikulin, A. A. Bir, K. V. Kostromin, T. V. Khomyakova // AIP Conference Proceedings, № 2466, 2022
4. Bir A. A., A study of the process of concentrating high-level radioactive simulation wastes on falling film evaporator / A. A. Bir, K. V. Kostromin, I. K. Novoselov, A. P. Khomyakov // AIP Conference Proceedings, №2313, 2020

РАЗРАБОТКА ИОННОГО ИСТОЧНИКА ДЛЯ КАМЕРЫ ИНЕРЦИАЛЬНОГО ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОГО УДЕРЖАНИЯ ПЛАЗМЫ

Ильичев И.В.[1], Прокуратов И.А.[1]
[1)] ФГУП ВНИИА им. Н. Л. Духова, Москва, Россия
E-mail: ilichev19942011@mail.ru

DEVELOPMENT OF AN ION SOURCE FOR AN INERTIAL ELECTROSTATIC PLASMA CONFINEMENT CHAMBER

Il'ichev I.V.[1], Procuratov I.A.[1]
[1)] Federal State Unitary Enterprise "All-Russian Research Institute of Automatics n.a. N.L. Dukhov" (VNIIA), Moscow, Russia

The report presents the results of studies of ion sources of mass-produced gas-filled neutron tubes as part of a laboratory system of inertial electrostatic plasma confinement (IEC) using deuterium as a working gas. The research is aimed at developing a compact neutron emitter based on IEC.

Системы инерциального электростатического удержания плазмы (ИЭУП), представляют собой газоразрядную камеру с двумя концентрическими электродами. При использовании изотопов водорода в качестве рабочего газа данные системы могут быть использованы в качестве источника быстрых нейтронов на базе реакций ядерного синтеза. Основной процент реакций генерации нейтронов происходит при взаимодействии ускоренных ионов дейтерия или трития с молекулами газа, сосредоточенными внутри сетчатого катода (зона реакции). При этом ионы, не вступившие во взаимодействия, имеют возможность повторно пролетать через зону реакции. Поэтому интегральный выход нейтронов систем ИЭУП складывается из осцилляций ускоренных ионов в зоне реакции.

По результатам проведенных ранее исследований системы на встречных пучках ионов [1] получено, что для обеспечения нейтронного выхода на уровне существующих генераторов на базе нейтронных трубок (~ 10^6 нейтр./с при DD-наполнении) необходимо достигнуть значения тока разряда, обеспечиваемого ионными источниками (ИИ), на уровне ~ 3 ÷ 5 мА. Такие токи можно получить при использовании одного мощного ионного источника или нескольких менее мощных.

В работе приводятся результаты исследований ИИ серийно выпускаемых нейтронных трубок. Основное отличие исследованных ИИ- длина анода и, как следствие, области генерации ионов. При использовании дейтерия в качестве рабочего газа в диапазоне давлений от 1 до 9 мТорр, напряжении на источнике ионов от 0,5 до 3,0 кВ и напряжение на катоде ИЭУП от –5 до –25 кВ определены

оптимальные рабочие характеристики ИИ. Путем подбора размера и количества постоянных магнитов, устанавливаемых на ИИ, для каждого из источников определена оптимальная конфигурация магнитной системы.

По результатам исследования выбран источник, обеспечивающий ток 1,6 мА при давлении в камере $2 \cdot 10^{-3}$ Торр. На основе проведённых исследований предложена конструкция ИИ на базе выбранного источника для применения в разрабатываемой камере ИЭУП (рис. 1).

Рис. 1. Предполагаемый вид камеры ИЭУП со сферическими электродами и ионными источниками.

1. И. А. Прокуратов, А. К. Дулатов, Б. Д. Лемешко, Ю. В. Михайлов, Система на встречных ионных пучках на основе инерциального электростатического удержания плазмы для генерации нейтронного излучения, сборник трудов VIII Международной конференции «Лазерные, плазменные исследования и технологии» ЛАПЛАЗ 2022, стр. 394.

ВЛИЯНИЕ ТЕХНОЛОГИИ ИЗГОТОВЛЕНИЯ ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ЭПОКСИДНОЙ СМОЛЫ, ЗАПОЛНЕННОЙ ОКСИДОМ СВИНЦА, НА РАДИАЦИОННО-ЗАЩИТНЫЕ СВОЙСТВА

Юзбашиева К.Ш.[1], Касков Д.О.[1], Воложенинов Т.П.[1], Ташлыков О.Л.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: Uzbashieva.Karina@yandex.ru

INFLUENCE OF PREPARATION TECHNOLOGY OF POLYMER COMPOSITE MATERIALS BASED ON LEAD OXIDE FILLED EPOXY RESIN ON RADIATION SHIELDING PROPERTIES

Iuzbashieva K.S[1], Kaskov D.O.[1], Volozheninov T.P.[1], Tashlykov O.L.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Radiation shielding properties of lead oxide (PbO) filled epoxy resin and electron microscopy were studied in this study. A comparative analysis of preparation technology of polymer composite materials has been carried out. Methods of improving the preparation technology have been proposed.

В работе приведены результаты исследования радиационно-защитных свойств полимерных композитных материалов (ПКМ) с тремя образцами PbO различного производства.

Вопросам обеспечения радиационной безопасности необходимо уделять особое внимание в связи с ростом использования в различных сферах деятельности человека источников ионизирующего излучения. Большой интерес представляет разработка материалов по защите населения от различных видов ионизирующего излучения.

Полимерные композиты обладают рядом преимуществ перед традиционными видами экранирующих материалов: гибкость, дешевизна, легкость, механическая и химическая стабильность [1]. Для создания экранирующих покрытий могут быть использованы соединения из микро- и наноматериалов, диспергированных в полимерной матрице. Ослабление достигается за счет сочетания свойств наполнителя и матрицы [2].

В качестве полимерной матрицы могут выступать полиуретан, полиэтилен высокой плотности и др. Среди них эпоксидные смолы отличаются высокой радиационной стойкостью по отношению к гамма-излучению. Также они обладают хорошими адгезионными свойствами, высокой ударной прочностью и стойкостью к истиранию, повышенной прочностью при изгибе, хорошей химической стойкостью и водостойкостью, прекрасной клеящей способностью.

Благодаря этому комплексу свойств эпоксидные смолы широко используются в атомной промышленности в качестве заливочных компаундов, для производства защитных покрытий, наливных полимерных полов [3].

Проведен визуальный анализ образцов, также исследована структура образцов с помощью электронной микроскопии, проведено сравнение методов изготовления ПКМ. По результатам исследовании выявлено различие в распределении наполнителя по объему матрицы. Предложены методы улучшения технологии изготовления ПКМ для устранения неоднородности распределения наполнителя с целью повышения радиационной стойкости материала.

1. Singleterry Jr, R. C., & Thibeault, S. A. (2000). Materials for low-energy neutron radiation shielding (No. L-17773).
2. Mohamed E. Mahmoud, Ahmed M. El-Khatib, Mohamed S. Badawi, Amal R. Rashad, Rehab M. El-Sharkawy, Abouzeid A. Thabet Fabrication, characterization and gamma rays shielding properties of nano and micro lead oxide-dispersed-high density polyethylene composites / Radiation Physics and Chemistry, 2018, vol. 145, pp 160-173.
3. Бормотов А. Н. Полимерные композиционные материалы для защиты от радиации. Монография. – 2012.

ОЦЕНКИ МОЩНОСТЕЙ ДОЗ ОТ ГАММА-ИЗЛУЧЕНИЯ ПРИРОДНЫХ РАДИОНУКЛИДОВ В СТРОИТЕЛЬНЫХ МАТЕРИАЛАХ СОВРЕМЕННЫХ ЖИЛЫХ ЗДАНИЙ

Изгагин В.С.[1], Жуковский М.В.[1], Онищенко А.Д.[1]
[1)] Институт промышленной экологии УрО РАН, Екатеринбург, Россия
E-mail: v.s.izgagin@urfu.ru

ESTIMATION OF DOSE RATES FROM NATURAL RADIONUCLIDES GAMMA RADIATION IN BUILDING MATERIALS OF MODERN RESIDENTIAL BUILDINGS

Izgagin V.S.[1], Zhukovsky M.V.[1], Onischenko A.D.[1]
[1)] Institute of Industrial Ecology UB RAS, Yekaterinburg, Russia

The natural radionuclides Ra-226, Th-232 and K-40 contributions to the gamma radiation dose rate from building materials of contemporary buildings are presented. The natural radionuclides specific activities measurement results in the eight large cities of the Russia are also demonstrated here.

Начиная с 1970-х годов и по настоящее время существует проблема внешнего облучения населения за счет природных радионуклидов, содержащихся в строительных материалах жилых зданий. Исследователи всегда были заинтересованы в определении такой величины как эффективная удельная активность природных радионуклидов [1]. Стоит заметить, что под природными радионуклидами в строительных материалах рассматриваем три основных: ^{226}Ra, ^{40}K, ^{232}Th. Определение величины удельной эффективной активности обеспечивает возможность проведения оценок мощностей эффективных или поглощенных доз внешнего гамма-излучения от содержащихся в минеральном сырье природных радионуклидов при любом их соотношении.

До сих пор в научной литературе отсутствуют прямые оценки внешнего облучения населения за счет строительных конструкций с учетом реального содержания природных радионуклидов в строительных материалах эксплуатируемых помещений. Поэтому возникает необходимость проведения прямых оценок эффективных доз на население от внешнего гамма-излучения природных радионуклидов в строительных материалах.

В проведенном исследовании с применением неразрушающего метода гамма-спектрометрии [2] были определены удельные активности ^{226}Ra, ^{40}K, ^{232}Th в жилых помещениях зданий 8 крупных городов Российской Федерации. Для улучшения репрезентативности выборки измерения были проведены в городах расположенных в различных географических, климатических и геологический зонах.

Средние значения удельных активностей природных радионуклидов по всем субъектам Российской Федерации следующие: ^{226}Ra – 12,5 Бк/кг, ^{40}K – 439,8 Бк/кг, ^{232}Th – 26,9 Бк/кг. Среднее значение эффективной удельной активности составило 85,2 Бк/кг и варьировалось в диапазоне от 22 до 256 Бк/кг. С учетом экспериментальных спектров излучения природных изотопов и с применением программных средств были выполнены расчеты мощностей эффективных доз от строительных материалов для изотропной геометрии облучения. Получены вклады ^{226}Ra, ^{40}K, ^{232}Th в суммарную эффективную мощность дозы гамма-излучения по различным городам. В результате были получены усредненные по всем 8 субъектам значения вкладов: ^{226}Ra – 14,4%, ^{40}K – 45,3%, ^{232}Th – 40,3%.

1. Крисюк Э. М. Нормирование радиоактивности строительных материалов // Гигиена и санитария. – 1980. – № 12. – С. 32–34.
2. Yarmoshenko I., Vasilyev A., Ekidin A. et. al. Non-destructive measurements of natural radionuclides in building materials for radon entry rate assessment // J. Radioanal. Nucl. Chem. – 2021. – V. 328, No 2. – P. 727–737. DOI: 10.1007/s10967-021-07690-

ПЛОТНОСТЬ ЭНЕРГИИ ФИЗИЧЕСКОГО ВАКУУМА И ОЦЕНКА МАССЫ КОМПАКТНОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ (ee) - ПАРЫ

Кащенко Н.М.[1], Кащенко М.П.[1, 2]
[1)] Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Уральский государственный лесотехнический университет, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: nad.kashenko@yandex.ru

ENERGY DENSITY OF THE PHYSICAL VACUUM AND ESTIMATION OF THE MASS OF A COMPACT ELECTRON (ee) – PAIR

Kashchenko N.M.[1], Kashchenko M.P.[1, 2]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia
[2)] Ural State Forest Engineering University, Yekaterinburg, Russia

Abstract. It is shown that the mass of a pair of electrons bound by contact interaction can be interpreted as the mass of the physical vacuum, localized in the region of overlap of electron wave packets in the case of a vacuum density close to that of nuclei.

Основная проблема синтеза ядер связана с преодолением кулоновского барьера. Эта проблема снимается, если между ядрами локализуется массивный отрицательный заряд [1-3]. Такой заряд создают электронные (ee) - пары с противоположными спинами. Согласно [4], притяжение электронов в паре обеспечивает контактное взаимодействие (при перекрытии волновых пакетов с радиусами $R \sim (10^{-14}\text{-}10^{-15})$ м). Допустим, что большая масса компактных (ee) - пар связана с захватом энергии физического вакуума (ФВ) из объема ΔV перекрытия волновых пакетов. Тогда при известной величине wФВ (плотности энергии ФВ) энергия (ee) – пары Eee задается соотношением:

$$E_{ee} = w_{ФВ}\Delta V. \qquad (1)$$

Оценка величины ΔV следует из элементарной геометрии пересечения двух шаров с радиусами R:

$$\Delta V/V = (1- \eta)2\ (1+ \eta/2),\quad V = 4\ \pi\ R3/3,\qquad \eta = r/R,\quad 0 < \eta < 1, \qquad (2)$$

где r равен половине расстояния между центрами перекрывающихся сфер. Ясно, что при $\eta = 1$ сферы только касаются, а при $\eta = 0$ их центры совпадают. При использовании модели пары, как объекта, вращающегося вокруг центра инерции, радиус вращения равен r. Квантование момента импульса при малых r приводит к релятивистским скоростям движения и массе (энергии) (ee) - пары, обратно пропорциональной r. В [1] в качестве примера проводилась оценка для $r = R/2$, то есть $\eta = 1/2$, при котором, согласно (2), $\Delta V/V = 5/16$. Ожидаемые значения масс mee при изменении r от $5\cdot10^{-15}$ м до $5\cdot10^{-16}$ м принадлежат интервалу (0.05 - 0.5) а.е.м. Используя (1), легко убедиться, что указанному интервалу масс при $\Delta V/V = 5/16$ соответствует интервал значений $w_{ФВ} \approx (4.58\cdot10^{31} - 4.58\cdot10^{34})$ Дж/м3 или массовая плотность $\rho_{ФВ} = w_{ФВ}/c^2 \approx (5\cdot10^{14} -$

$5 \cdot 10^{17}$) кг/м^3. Полученные оценки указывают на возможную неоднородность плотности ФВ. Это вполне естественно при сравнении, например, областей космоса, свободных от вещества, и локальных межъядерных и, тем более, внутриядерных областей, где ФВ должен быть возбужден. Разумеется, для холодного синтеза ядер представляет интерес состояние возбужденного ФВ. Отметим, неоднородность ФВ (возможность образования доменов ФВ), принимается в качестве одной из базисных идей в [5]. Интересно, что верхнее значение приведенного выше интервала для ρФВ оказывается больше плотности ядерной материи ρя $\approx 2 \cdot 10^{17}$ кг/м^3, но меньше оценки [6] квантовой электродинамики $\rho_{КЭД} \approx 2 \cdot 10^{18}$ кг/м3. В условиях холодного ядерного синтеза предпочтительной представляется оценка $\rho_{ФВ} \leq$ ρя. В случае фиксированных $\rho_{ФВ}$ и R диапазон m_{ee} можно получить, варьируя ΔV/V. В частности, данным [7] о массах $m_{ee} \approx (0.05 – 0.08)$ а.е.м. при $\rho_{ФВ} \approx \rho_я$ и $R = 10^{-15}$ м соответствует интервал значений $\Delta V/V \approx (0.1 – 0.16)$.

1. М. П. Кащенко, Н. М. Кащенко. Низкотемпературный ядерный синтез: введение в проблему и ее концептуальное решение. Екатеринбург, УГЛТУ (2022) 180 с.
2. Kashchenko N. M., Kashchenko M. P. (2022). «Formation of massive electron pairs as a necessary condition for low-temperature nuclear fusion and the existence of a new state of matter». // In V. L. Derbov (Ed.), Saratov Fall Meeting 2021: Laser Physics, Photonic Technologies, and Molecular Modeling [121930U] (Progress in Biomedical Optics and Imaging - Proceedings of SPIE; Том 12193). SPIE. https://doi.org/10.1117/12.2626912
3. Kashchenko M. P., Kashchenko, N. M. (2022). «Development of a model of a quasi-molecular state for low-temperature synthesis of nuclei and interpretation of the formation of chemical elements in the process of vacuum melting of a metal by an electron beam». // In V. L. Derbov (Ed.), Saratov Fall Meeting 2021: Laser Physics, Photonic Technologies, and Molecular Modeling [121930V] (Progress in Biomedical Optics and Imaging - Proceedings of SPIE; Vol. 12193). SPIE. https://doi.org/10.1117/12.2626913
4. Santilli R. M.. Foundations of Hadronic Chemistry. With Applications to New Clean Energies and Fuels. Boston - Dordrecht - London: Kluwer Academic Publishers (2001) 554 p.
5. Дятлов В. Л. Поляризационная модель неоднородного физического вакуума. Новосибирск, Изд-во Ин-та математики (1998) 184 с.
6. Фейнман Р., Хибс А. Квантовая механика и интегралы по траекториям. М., Мир (1968) 384 с..
7. M.P. Kashchenko, M.A. Kovalenko, V.I.Pechorsky , A.I. Kupryazhkin, N.M. Kashchenko// Registration of titanium atoms with increased mass as a consequence of the capture of massive electron pairs, Abstracts of the XXVII russian conference on cold nuclear transmutation of chemical elements and ball lightning (Moscow 2022), pp. 29 - 30. https://disk.yandex.ru/i/X_7D1faIKfb3wQ

ОЦЕНКА МИНИМАЛЬНЫХ ЭНЕРГИЙ ЭЛЕКТРОННЫХ (ee) - ПАР ДЛЯ РЕАКЦИЙ СИНТЕЗА МАССИВНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

Кащенко Н.М.[1], Кащенко М.П.[1, 2]
[1)] Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Уральский государственный лесотехнический университет , г. Екатеринбург, Россия
E-mail: nad.kashenko@yandex.ru

ESTIMATION OF THE MINIMUM MASSES OF ELECTRON (ee) - PAIRS FOR SYNTHESIS REACTIONS OF MASSIVE ELEMENTS

Kashchenko N.M.[1], Kashchenko M. P.[1, 2]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia
[2)] Ural State Forest Engineering University, Yekaterinburg, Russia

Abstract. An estimate is given for the minimum masses of electron pairs bound by contact interaction. The reactions of synthesis of massive elements with absorption from one to four electron pairs are considered. The neutrino contribution was not taken into account.

В [1-3] предложена концептуальная модель синтеза ядер. Ядра сближаются за счет притяжения к отрицательному заряду КК-активаторов, образующихся в межъядерном пространстве. КК-активаторы содержат компактные массивные (ee)-пары электронов, связанных контактным взаимодействием. Указанный подход проясняет механизм синтеза массивных ядер, сопровождающегося захватом массивных (ee)–пар. Согласно [1-3], ожидаемые значения масс (ee)-пар mee лежат в интервале (0.05-0.5) а.е.м. Минимальную массу $(m_{ee})_{min}$ можно найти из требования нулевого энергетического баланса реакции, которая, без учета захвата энергии (ee)–пар, была бы эндотермической ($Q < 0$). Тогда (mee)min определяется из соотношения

$$(m_{ee})_{min}=-Q/kc^2, \quad (1)$$

где k-число захваченных (ee)–пар, c–скорость света в вакууме. При такой оценке не учитывается предполагаемый нейтринный вклад, что занижает значение $(m_{ee})_{min}$. Приведем ряд реакций:

$_{22}Ti^{50} + {}_{22}Ti^{50} + (e\uparrow e\downarrow) \rightarrow [под]\ {}_{42}Mo^{100}$, $(m_{ee})_{min} \approx 0.018$ а.е.м. , (2)

$_{26}Fe^{56} + {}_{26}Fe^{56} + (e\uparrow e\downarrow) \rightarrow {}_{50}Sn^{112}$, $(m_e e)_{min} \approx 0.035$ а.е.м. , (3)

$_{40}Z^{96} + {}_{40}Z^{96} + (e\uparrow e\downarrow) \rightarrow {}_{78}Pt^{192}$, $(m_{ee})_{min} \approx 0.144$ а.е.м. , (4)

$_{27}Co^{59} + {}_{27}Co^{59} + 2(e\uparrow e\downarrow) \rightarrow {}_{50}Sn^{118}$, $(m_{ee})_{min} \approx 0.018$ а.е.м. , (5)

$_{50}Sn^{122} + {}_{33}As^{75} + 2(e\uparrow e\downarrow) \rightarrow {}_{7}[под]\ 9Au^{197}$, $(m_{ee})_{min} \approx 0.071$ а.е.м. , (6)

$_{28}Ni^{58} + {}_{28}Ni^{58} + 3(e\uparrow e\downarrow) \rightarrow {}_{50}Sn^{116}$, $(m\ [под]\ e_e)_{min} \approx 0.010$ а.е.м. , (7)

$_{50}Sn^{122} + {}_{50}Sn^{117} + 3(e\uparrow e\downarrow) \rightarrow {}_{94}Pu^{239}$, $(m_{ee})_{min} \approx 0.018$ а.е.м (8)

$_{50}Sn^{118} + {}_{50}Sn^{117} + 4(e\uparrow e\downarrow) \rightarrow {}_{92}U^{235}$, $(m_{ee})_{min} \approx 0.144$ а.е.м. (9)

Стандартные нейтринные вклады для краткости опущены. Значения $(m_{ee})_{min}$ не выходят за ожидаемый верхний интервал значений 0.5 а.е.м. Также есть

значения < 0.05 а.е.м., выпадающие из ожидаемого интервала снизу. Это объясняется отсутствием учета в энергетическом балансе нейтринных вкладов. Отметим близость с данными [4], для всех изотопов титана, использованного в качестве анода, часть атомов имели дополнительные массы ≈ 0.05-0.08 а.е.м. Это интерпретируется как появление (ее)-пар в электронной оболочке атомов. Значения m_{ee} коррелируют с данными (1)-(8) для $(m_{ee})_{min}$ большинства приведенных реакций.

1. М.П. Кащенко, Н.М.Кащенко. Низкотемпературный ядерный синтез: введение в проблему и ее концептуальное решение. Екатеринбург, УГЛТУ (2022) 180 с.
2. Kashchenko N. M., Kashchenko M. P. (2022). «Formation of massive electron pairs as a necessary condition for low-temperature nuclear fusion and the existence of a new state of matter». // In V. L. Derbov (Ed.), Saratov Fall Meeting 2021: Laser Physics, Photonic Technologies, and Molecular Modeling [121930U] (Progress in Biomedical Optics and Imaging - Proceedings of SPIE; Том 12193). SPIE. https://doi.org/10.1117/12.2626912
3. Kashchenko M. P., Kashchenko, N. M. (2022). «Development of a model of a quasi-molecular state for low-temperature synthesis of nuclei and interpretation of the formation of chemical elements in the process of vacuum melting of a metal by an electron beam». // In V. L. Derbov (Ed.), Saratov Fall Meeting 2021: Laser Physics, Photonic Technologies, and Molecular Modeling [121930V] (Progress in Biomedical Optics and Imaging - Proceedings of SPIE; Vol. 12193). SPIE. https://doi.org/10.1117/12.2626913
4. M.P. Kashchenko, M.A. Kovalenko, V.I.Pechorsky , A.I. Kupryazhkin, N.M. Kashchenko// Registration of titanium atoms with increased mass as a consequence of the capture of massive electron pairs, Abstracts of the XXVII russian conference on cold nuclear transmutation of chemical elements and ball lightning (Moscow 2022), pp. 29 - 30.

АЛЬТЕРНАТИВНЫЙ СПОСОБ УТИЛИЗАЦИИ ЗАГРЯЗНЕННОЙ МОРСКОЙ ВОДЫ НА АЭС «ФУКУСИМА-1»

Касков Д.О.[1], Воложенинов Т.П.[1], Ташлыков О.Л.[1], Юзбашиева К.Ш.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: kaskov.dd@yandex.ru

ALTERNATIVE METHOD OF DISPOSAL OF POLLUTED SEAWATER AT THE FUKUSHIMA-1 NUCLEAR POWER PLANT

Kaskov D.O.[1], Volozheninov T.P.[1], Tashlykov O.L.[1], Iuzbashieva K.S.[1]
[1)] Ural Federal University named after the First President of Russia B.N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia

The paper proposes a method for the disposal of radioactive water accumulated at the Fukushima nuclear power plant after the accident, by using it for the manufacture of concrete structures for various purposes, as an alternative to dumping this water into the ocean.

11 марта 2011 года на АЭС «Фукусима-1» в результате землетрясения и последовавшего за ним цунами произошла радиационная авария. В процессе ликвидации ее последствий, для предотвращения расплавления твэлов в реакторы АЭС "Фукусима" длительное время закачивали воду. Это привело к чрезвычайной ситуации – загрязненную радиоактивными изотопами воду необходимо было хранить, что связано с большими экономическими затратами [1]. На сегодняшний день, более 1,25 млн тонн радиоактивной воды хранится в резервуарах на территории АЭС Фукусима, и этот объем продолжает увеличиваться [2].

13 апреля 2021 года Кабинет министров Японии принял законопроект о сбросе воды с АЭС Фукусима в Тихий океан, что вызывало обеспокоенность и протесты со стороны соседних стран, включая Китай, Республику Корея и Филиппины, а также крупных международных организаций (Форума Тихоокеанских островов и др.) [1].

В настоящей работе предложен и проанализирован способ очистки загрязненной воды путем ионоселективной сорбции и кондиционирования при помощи технологии COREBRICK, разработанной компанией ЭКСОРБ [3]. Затем очищенная вода используется для получения бетонных изделий необходимого качества, которые могут быть использованы для сооружения хранилищ и других зданий.

По данным, представленным эксплуатирующей организацией TEPCO [4], рассчитана средняя активность полученного бетонного раствора, а также проведено моделирование с использованием метода Монте-Карло для оценки

радиационной безопасности и соответствия полученного бетона международным нормам и правилам.

Результаты исследования показывают, что данный способ утилизации радиоактивной воды состоятелен и может быть использован на АЭС «Фукусима» как альтернатива сбросу в Тихий океан.

1. Chen X., Xu Q. Reflections on international dispute settlement mechanisms for the Fukushima contaminated water discharge //Ocean & Coastal Management. – 2022. – Т. 226. – С. 106278.
2. YONHAP NEWS AGENCY/ S. Korea to offer sea radiation level via website URL: https://en.yna.co.kr/view/AEN20210702007000320 (DATE OF THE APPLICATION :15.01.2022)
3. Патент № 2706019 C1 Российская Федерация, МПК G21F 9/04. способ переработки жидких радиоактивных отходов, содержащих, в том числе, изотопы трития : № 2018133705 : заявл. 21.09.2018 : опубл. 13.11.2019 / В. П. Ремез. – EDN UNVRNA.
4. TEPCO, “Radiation concentration estimates for each tank area (as of March 31, 2020)” (TEPCO 31 December 2019); www4.tepco.co.jp/en/sp/decommission/progress/watertreatment/images/tankarea_en.pdf.

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ КЛАССИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ ЯДЕРНОГО РЕАКТОРА И КИНЕТИКИ МАРКОВСКОЙ ЦЕПНОЙ ЯДЕРНОЙ РЕАКЦИИ ДЕЛЕНИЯ

Комарова Я.О.[1], Михайлова П.А.[1], Ошканов Н.Н.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Ельцина Б. Н., Екатеринбург, Российская Федерация
E-mail: komarovayaroslawa@yandex.ru

COMPARATIVE ANALYSIS OF CLASSICAL NUCLEAR REACTOR KINETICS AND KINETICS OF MARKOV CHAIN FISSION REACTION

Komarova Y.O.[1], Mikhaylova P.A.[1], Oshkanov N.N.[1]
[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia Yeltsin B.N., Ekaterinburg, Russian Federation

Comparison of the classical kinetics of the nuclear reactor with the kinetics of the Markov chain nuclear reaction had established the limits of application of the classical kinetics, depending on the reactivity and the degree of divergence from the kinetics of the Markov chain reaction.

Кинетика активной зоны ядерного реактора изучает изменение плотности нейтронов в ней при изменении ее реактивности и применяется в т.ч. для обоснования безопасности реактора [1].

Классическая кинетика сформирована путем приближенного интегрирования уравнения переноса нейтронов для непрерывной функции плотности нейтронов на протяжении всей цепной ядерной реакции (ЦЯР) [2]. Однако, т.к. изменение функции плотности нейтронов происходит скачкообразно в каждом цикле при делениях ядер, то такое интегрирование можно выполнить только для одного цикла ЦЯР [3] и его применения для большого числа циклов вряд ли легитимно. Как результат, решение основного уравнения классической кинетики в результате приближенности имеет вид неограниченного роста мощности реактора при вводе положительной реактивности. С точки зрения физики, это не может произойти, т.к. скорость роста запаздывающих нейтронов отстает от скорости роста мгновенных нейтронов, иначе не было бы эффекта замедления роста мощности реактора. Такое отставание скорости роста запаздывающих нейтронов должно привести ограничение роста мощности, а не к ее бесконечному росту.

Согласно физике процесса, ЦЯР является дискретной последовательностью циклов, в которой деление ядер в каждом цикле производится в результате поглощения нейтронов предыдущего цикла. Это соответствует теории Марковской цепи, уравнением которой для ЦЯР является произведение выходных плотностей нейтронов циклов. Оно решается точно, поэтому кинетику активной зоны реактора можно рассматривать в модели Марковской ЦЯР.

Решение уравнения кинетики в виде произведения выходных плотностей нейтронов циклов имеет асимптотическую стабилизацию мощности реактора [4], что подтверждает ограничение роста мощности.

Целью исследования явилось установление границ совместимости классической кинетики и кинетики Марковской цепи. Это выполнено методом численного эксперимента на основании полученных в [4] формул.

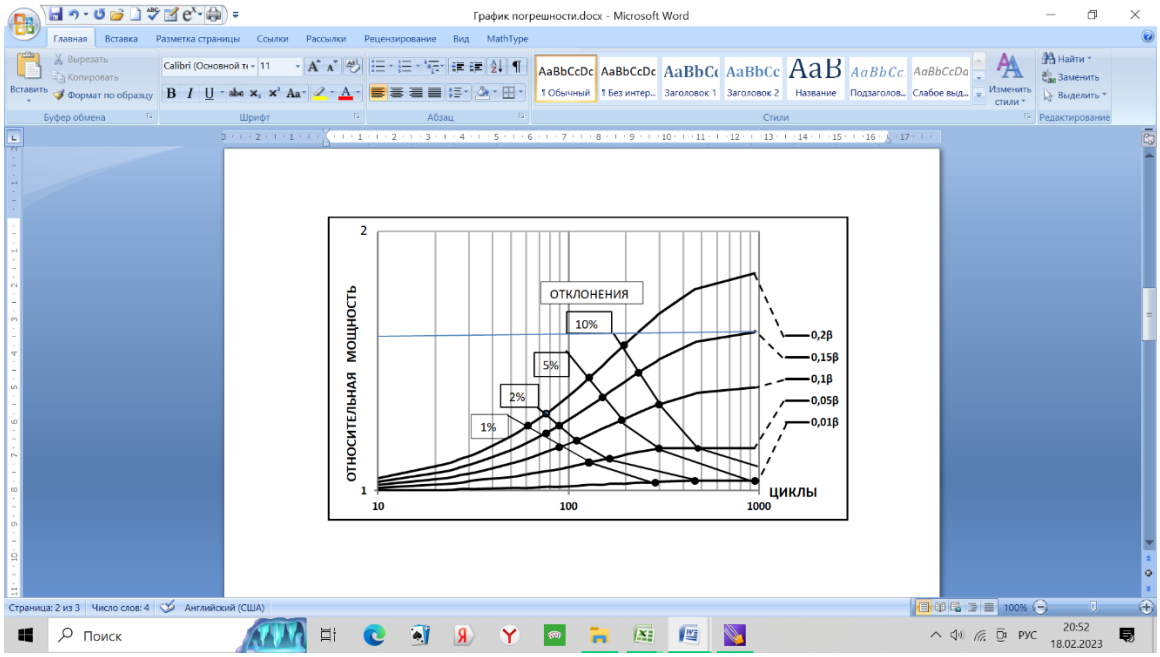


Рис. 1. Зависимость диапазона применимости классической кинетики от вводимой реактивности и отклонения от кинетики Марковской цепной реакции.

Сравнительный анализ классической кинетики и кинетики Марковской ЦЯР и определил границы применимости классической кинетики, которые зависят от вводимой положительной реактивности и величины отклонений от точной Марковской кинетики. На Рис. 1 показано расположение верхних границ, которые определяются в зависимости от величин отклонений от Марковской кинетики и реактивности.

1. Селезнев Е. Ф. Кинетика реакторов на быстрых нейтронах /Е. Ф. Селезнев; – Москва: Наука, 2013. – 250 с.
2. Белл Дж. И. Хетрик Теория ядерных реакторов / Дж. И. Белл, С. Глестон. – Москва : Атомиздат, 1974. 460 с.
3. Хетрик Д. Динамика ядерных реакторов / Д. Хетрик, Москва :Атомиздат, 1975. 400 с.
4. On nonconformity of the classical reactor kinetics to physics of a chain reaction /, N. N. Oshkanov. Proceedings of SGEM 2018, vol. 4.1, pp. 31-45.

ИССЛЕДОВАНИЕ РАДИАЦИОННОЙ СТОЙКОСТИ МОНОКРИСТАЛЛОВ И ОПТИЧЕСКОЙ КЕРАМИКИ НА ОСНОВЕ ГАЛОГЕНИДОВ ТАЛЛИЯ И СЕРЕБРА

Кондрашин В.М.[1], Салимгареев Д.Д.[1], Львов А.Е.[1], Южакова А.А.[1], Корсаков А.С.[1], Жукова Л.В.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
E-mail: kondrashin.96@yandex.ru

INVESTIGATION OF RADIATION RESISTANCE OF SINGLE CRYSTALS AND OPTICAL CERAMICS BASED ON THALLIUM AND SILVER HALIDES

Kondrashin V.M.[1], Salimgareev D.D.[1], Lvov A.E.[1], Yuzhakova A.A.[1], Korsakov A.S.[1], Zhukova L.V.[1]
[1)] Ural Federal University named after first president of Russia B.N. Yeltsin, Ekaterinburg, Russia

The research of radiation resistance of single crystals and optical ceramics based on the systems AgCl0.75Br0.25 – TlCl0.74Br0.26; TlBr0.54I0.46 – AgCl0.75Br0.25. is presented in this paper. As a result of beta and gamma irradiation, an insignificant change in the transmittance level of the samples.

В данной работе было проведено исследование влияния бета и гамма-излучения на монокристаллы и оптическую керамику на основе систем AgCl0.75Br0.25-TlCl0.74Br0.26; TlBr0.54I0.46- AgCl0.75Br0.25. Образцы различного состава были синтезированы в научной лаборатории «Волоконных технологий и фотоники» методами термозонной кристаллизации синтеза, Бриджмена (в случае монокристаллов), направленной кристаллизации. Из полученных образцов были изготовлены плоскопараллельные пластины методом горячего прессования [1]. Процедуре облучения предшествовало определение спектров пропускания для сравнения их с результатами после облучения.

В ходе исследований образцы подвергались поэтапному облучению в инновационном внедренческом центре «Радиационной стерилизации» с использованием линейного ускорителя электронов УЭЛР-10-10С с энергией до 10 МэВ. Образцы подвергались поэтапному набору дозы от 0 до 1000 кГр, с шагом в 100 кГр и 200 кГр. После каждого облучения проводилась регистрация спектров на ИК-Фурье спектрометре Shimadzu IRPrestige-21 с использованием светоделителя CsI и детектора DLaTGS, в диапазоне длин волн от 7800 до 240 см−1 (1,28 – 41,7 мкм).

Воздействие гамма-излучения проводилось на закрытом радиоактивным источнике типа ИГИ-Ц-3-8 с радионуклидом – Cs137. Активность радионуклида

составила 5,85х108 Бк на 04.04.2016. Источник герметичен, что установлено иммерсионным методом согласно паспортным данным. Аналогично, как и с исследованием бета-излучения, облучение производилось в несколько этапов. На первом этапе образцы подвергались воздействию излучения в течение 336 часов при мощности эквивалента дозы (МЭД) 210 мкЗв\ч. МЭД регистрировался приборами ДКС АТ-1123, диапазон измерения от 0,1 нЗв до 100 Зв. Для сравнения с исходными данными с образцов были сняты спектры пропускания, после чего образцы были направлены на дальнейшее облучение. На втором этапе, образцы подвергались воздействию излучения в течение 1296 часов, по завершению которого также были сняты спектры.

В результате исследования было выявлено, что уровень пропускания оптических материалов имеет незначительное снижение после облучения, при этом монокристаллы и оптическая керамика не теряют своих оптических свойств. Полученные в ходе эксперимента значения позволяют сделать вывод о существенной радиационной стойкости материалов на основе галогенидов серебра и таллия, а также о больших возможностях применения этих материалов в высокотехнологичных отраслях промышленности.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-73-10108, https://rscf.ru/project/21-73-10108/.

1. Salimgareev D.D., Lvov A.E. ,Yuzhakova A.A., Pestereva P.V., Zhukova L.V. Synthesis of optical materials based on the TlBr0.46I0.54 – AgI system and investigation of their optical properties, Journal of Alloys and Compounds, 938, 168525, (2023)

О ВОЗМОЖНОСТЯХ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ АЛЬФА-БЕТА-РАДИОМЕТРА УМФ−2000−М С ПРОГРАММНЫМ ОБЕСПЕЧЕНИЕМ “SPDEC” ДЛЯ АЛЬФА-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКИХ ИЗМЕРЕНИЙ

Космычёв А.С.[1], Семенищев В.С.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Российская Федерация
E-mail: a.kosmychev@mail.ru

ON POSSIBILITY OF USING AN ALPHA BETA RADIOMETER UMF-2000-M WITH “SPDEC” SOFTWARE FOR ALPHA SPECTROMETRY

Kosmychev A.S.[1], Semenishchev V.S.[1]
[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia

The work describes the possibility of using an alpha beta radiometer UMF-2000-M with “SpDEC” software for alpha spectrometry. Linear calibration curve was obtained for a series of thin alpha sources based on different radionuclides.

Радиометрические и спектрометрические измерения являются важной частью работ, проводимых как в лабораториях предприятий ядерного топливного цикла, так и в различных природоохранных и контролирующих организациях. Низкофоновый альфа-бета-радиометр УМФ-2000, разработанный ООО НПП «Доза» (г. Москва), предназначен для определения суммарной активности альфа- и бета-излучающих радионуклидов и является одним из наиболее популярных в России приборов в своем классе. В начале 2000-х годов радиометр был дооснащен аналогово-цифровым преобразователем и программным обеспечением «SpectraDec», что позволяет использовать его в качестве спектрометра. Однако, наиболее существенным недостатком поставляемого программного обеспечения является полное отсутствие возможностей для энергетической градуировки прибора, что затрудняет дальнейшее определение радионуклидного состава измеряемых проб.

В данной работе была изучена возможность градуировки радиометра УМФ-2000 со спектрометрическим комплексом «SpDec». Для этого был приготовлен ряд тонкослойных источников на основе радионуклидов с различными энергиями альфа- и бета-излучения. В качестве источников альфа-излучения были взяты ОСАИ на основе Pu-238, Pu-239, а также приготовлены электролитические источники U-233, U-238+U-234, Th-232+Th-228. Кроме того, был получен источник Po-210 самопроизвольным осаждением из кислого раствора на серебряный диск, а также источники Ra-223 (+ дочерние продукты распада), Ra-224 (+ дочерние продукты распада), Th-230, Np-237, полученные сорбцией соответствующих изотопов на тонкослойном сорбенте MnO 2 –ПЭ.

Полученный источники были измерены на УМФ-2000 в спектрометрическом режиме, и по позиции измеренного альфа-пика и известной энергии была построена градуировочная зависимость (рис.1).

[Рисунок 1]

Видно, что градуировочная зависимость по энергии имеет линейный характер с коэффициентом корреляции R 2 = 0.9866. Таким образом, измерение ряда источников на базе различных альфа-излучающих радионуклидов дает возможность построения градуировочной зависимости вручную с последующей обработкой спектра. Наибольший интерес в данном случае представляет источник на основе природного тория, т.к. один источник в случае радиоактивного равновесия будет иметь 6 альфа-излучающих радионуклидов с диапазоном энергий от 3,98 МэВ (Th-232) до 8,78 МэВ (Po-212). Основным недостатком прибора является проведение измерений при атмосферном давлении, из-за чего толщина пробы (конкретно, расстояние между верхним краем пробы и детектором) сильно влияет на градуировку, поэтому градуировка в идеале должна проводиться отдельно под каждый тип проб. В целом, можно сказать, что с учетом низкой цены (на порядок ниже, чем для альфа-спектрометром) прибор перспективен для использования в радиохимических лабораториях.

Работа поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (в рамках базовой части госзадания, проект № FEUZ-2023-0013).

ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАВИСИМОСТИ ПЛОТНОСТИ ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ ОТ ТЕХНОЛОГИИ ИЗГОТОВЛЕНИЯ

Кувшинова Е.В.[1], Широнина А.М.[1], Ташлыков О.Л.[1], Аладаилах М.В.[1]
[1)] Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: kuvsinovae793@gmail.com

INVESTIGATION OF THE DEPENDENCE OF THE DENSITY OF POLYMER COMPOSITE MATERIALS ON THE MANUFACTURING TECHNOLOGY

Kuvshinova E. V.[1], Shironina A.M.[1], Tashlykov O.L.[1], Aladailakh M.V.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Experimental work has been carried out to study the dependence of the density of polymer composite materials on their manufacturing technology.

Проведена экспериментальная работа по исследованию зависимости плотности полимерных композитных материалов от технологии их изготовления.

Ядерная энергия используется в различных областях, включая медицину, промышленность и производство материалов.

Ядерная отрасль инициирует поиск новых материалов для защиты от излучения. Ученые сосредоточились на разработке более гибких, легких и эффективных защитных материалов, таких как полимерные композиты, которые способны эффективно ослаблять ионизирующее излучение. Эти материалы привлекают большое внимание в области радиационной защиты благодаря способности ослаблять излучение, механической стабильности и небольшому весу [1].

Оптимизация состава радиационно-защитных материалов может быть использована для улучшения радиационной защиты персонала. Свинец и бетон являются традиционными защитными материалами, но их токсичность и растрескивание ограничивают их использование. Полимерные матрицы позволили разрабатывать материалы, способные эффективно ослаблять ионизирующее излучение за счет оптимизации состава наполнителей.

Полимерные композитные материалы (ПКМ) могут иметь различные матрицы (полиэтилен, эпоксидная смола, сланцевая зола и др.). В настоящее время во многих странах значительно возрос интерес к исследованиям ПКМ с различными наполнителями.

Представленная работа посвящена исследованию зависимости плотности ПКМ от технологии их изготовления, поскольку радиационно-защитные свойства ПКМ прямо пропорциональны их плотности.

Проведено экспериментальное исследование плотности образцов ПКМ с наполнителем из пуццолана и муки из оливковых выжимок, изготовленных в

Иорданском институте наук и технологий. Пуццолан – смесь вулканического пепла, пемзы и туфа. Оливковые выжимки – это остатки процесса производства оливкового масла, спрессованные на заводе в Иордании.

Измерения плотности проводились с помощью прибора «плотномер МН-300А» с точностью до 0,001 г/см^3 методом гидростатического взвешивания образцов. В качестве рабочей жидкости использовалась вода.

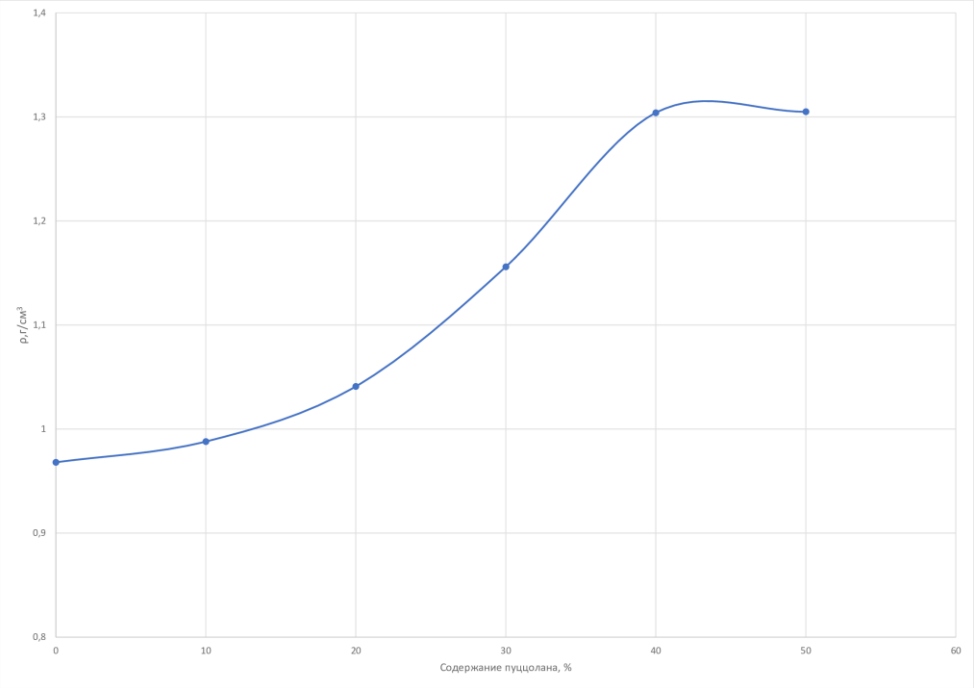


Рис. 1. Зависимость максимальной плотности образца от процентного содержания наполнителя в матрице.

При получении композитов некоторые образцы были изготовлены с использованием ультразвукового воздействия, что вызвало отклонение плотности образцов при одинаковых концентрациях на 14%. При увеличении концентрации пуццолана от 0 до 50% заметно возрастает плотность образцов .

1. Бормотов А.Н., Прошин А.П., Баженов Ю.М., Данилов Ю.М., Соколова Ю.А. Полимерные композиционные материалы для защиты от радиации: монография. – М.: Издательство «Палеолит», (2006). – 272 с.

ОЦЕНКА РАДИАЦИОННЫХ РИСКОВ ПРИ РАСПРЕДЕЛЕННОМ ВО ВРЕМЕНИ ОБЛУЧЕНИИ

Макеева Е.С.[1], Жуковский М.В.[2]
[1)] Уральский Федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Институт промышленной экологии, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: katya.makeeva.0411@bk.ru

ASSESSMENT OF RADIATION RISKS WITH TIME-DISTRIBUTED EXPOSURE

Makeeva E.S.[1], Zhukovskii M.V.[2]
[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia
[2)] Institute of Industrial Ecology, Yekaterinburg, Russia

This article assesses the radiation risks of occupational exposure. Based on the calculations obtained, conclusions are drawn about the discrepancy between radiation safety standards in accordance with dose limits and radiation risks.

В соответствии с нормативными требованиями норм радиационной безопасности (НРБ) радиационный риск персонала в любой год не должен превышать 10^{-3}. В связи с этим необходима оценка не только общего риска, но и его распределения по возрастам. В соответствие с НРБ предел эффективной дозы составляет 20 мЗв/год. Для оценки соответствия требований НРБ по дозе и требований НРБ по рискам были проведены соответствующие расчеты радиационных рисков. Для оценок рисков были отдельно использованы модели для солидных опухолей и лейкемии.

После проведения расчетов было показано, что при равномерном облучении 20 мЗв/год в возрасте от 20 до 60 лет наблюдается превышение радиационных рисков для солидных опухолей.

Солидные опухоли:

Избыточный относительный риск линейный (от достигнутого возраста): $1{,}05*10^{-3}$ – $1{,}63*10^{-3}$ для мужчин, $1{,}01*10^{-3}$ – $2{,}48*10^{-3}$ для женщин, основное превышение рисков после 60 лет.

Избыточный относительный риск по модели BEIR VII: $1{,}47*10^{-3}$ в 60 лет для мужчин, $1{,}14*10^{-3}$ – $2{,}49*10^{-3}$ для женщин, основное превышение рисков после 60 лет.

Избыточный относительный риск по данным Хиросимы и Нагасаки (Rep13): $1{,}08*10^{-3}$ – $1{,}78*10^{-3}$ для мужчин, $1{,}36*10^{-3}$ – $2{,}50*10^{-3}$ для женщин, основное превышение рисков после 60 лет.

Для лейкозов радиационные риски не превышают 10^{-3}.

Использование нескольких моделей было принято для верификации расчетов.

В связи с этим были рассмотрены возрастные варианты ограничений профессионального облучения. Например, ограничение облучения до 10 мЗв/год в возрасте от 20 до 30 лет. По некоторым моделям было получено превышение радиационных рисков. Примерно $1{,}2*10^{-3}$ для мужчин в возрасте 60 лет, и $1{,}95*10^{-3}$ для женщин в возрасте 60 лет. После 60 лет риски существенно превышают 10^{-3}, несмотря на прекращение облучения 20 мЗв в 60 лет.

В связи с этим можно сделать выводы, что требования НРБ по ограничению эффективной дозы не соответствуют требованиям этого же документа по ограничению предельного уровня радиационного риска для персонала.

1. Демин Владимир Фёдорович Автореферат диссертации на соискание ученой степени доктора технических наук «Анализ риска в обеспечении безопасности человека в чрезвычайных ситуациях».
2. UNSCEAR Report 2006. Appendix A. Epidemiological studies of radiation and cancer. UNSCEAR 2006.
3. Preston, D. L., Shimizu, Y., Pierce, D., Suyama, A. and Mabuchi, K. Studies of Mortality of Atomic Bomb Survivors. Report 13: Solid Cancer and Noncancer Disease Mortality: 1950–1997. Radiation Research. 160, 381–407 (2003).

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ИМПУЛЬСНОГО НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО ПРОТОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА РАБОТОСПОСОБНОСТЬ МИКРОКОНТРОЛЛЕРА

Марчук М.В.[1], Дубровских С.М.[2]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Российский Федеральный Ядерный Центр – Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики имени академика Е.И. Забабахина, г. Снежинск, Россия
E-mail: vakulina-masha@mail.ru

RESEARCH OF THE INFLUENCE OF IMPULSE LOW-ENERGY PROTON RADIATION ON THE EFFICIENCY OF THE MICROCONTROLLER

Marchuk M.V.[1], Dubrovskikh S.M.[2]
[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia
[2)] Russian Federal Nuclear Center - All-Russian Research Institute of Technical Physics named after academician E.I. Zababakhina, Snezhinsk, Russia

The purpose of this work is to research influence of impulse low-energy proton radiation on the efficiency of the most complex semiconductor product – microcontroller and to determine dominant failure mechanism.

До недавнего времени считалось, что одиночные сбои (ОС) в космическом пространстве вызывают только тяжелые ионы и высокоэнергетические протоны. Однако с развитием технологий около 10 лет назад была обнаружена чувствительность микросхем с топологией менее 100 нм к частицам с энергией около 1 МэВ [1]. Причем экспериментально определенное сечение сбоев под действием низкоэнергетических протонов превышает значение для частиц высоких энергий на 3-4 порядка. Таким образом, низкоэнергетические протоны могут представлять значительную угрозу для спутников на низких орбитах.

В данной работе пучки протонов генерировались на лазерном ускорителе, который никогда ранее не применялся для исследований стойкости микроэлектронных устройств к заряженным частицам. Источником протонов служила алюминиевая мишень (Al), толщиной 5 мкм при фокусировке на ней мощного импульса излучения Ti:Sa-лазера с энергией до 2 Дж и ультракороткой длительностью ≈25 фс. В эксперименте импульсному воздействию протонов подвергался микроконтроллер (МК) отечественного производства с проектной нормой 180 нм, изготовленный по технологии «объёмный кремний». При воздействии протонного импульса имеет место потеря информации в ячейках памяти оперативного запоминающего устройства (ОЗУ) МК. При этом оставался

открытым вопрос о причинах сбоя ячеек памяти: эффект обусловлен объемной ионизацией или связан с одиночными радиационными эффектами.

В работе были определены конструктивные особенности исследуемого образца и химический состав материала кристалла МК, посредством анализа методом масс-спектроскопии и применения оптического и электронного микроскопов, поскольку вариация материалов и толщин слоев влияет на оценку линейных потерь энергии (ЛПЭ) в чувствительном объеме (ЧО) кристалла. Для расчетов ЛПЭ в SRIM была принята послойная структура образца, представленная на рисунке 1.

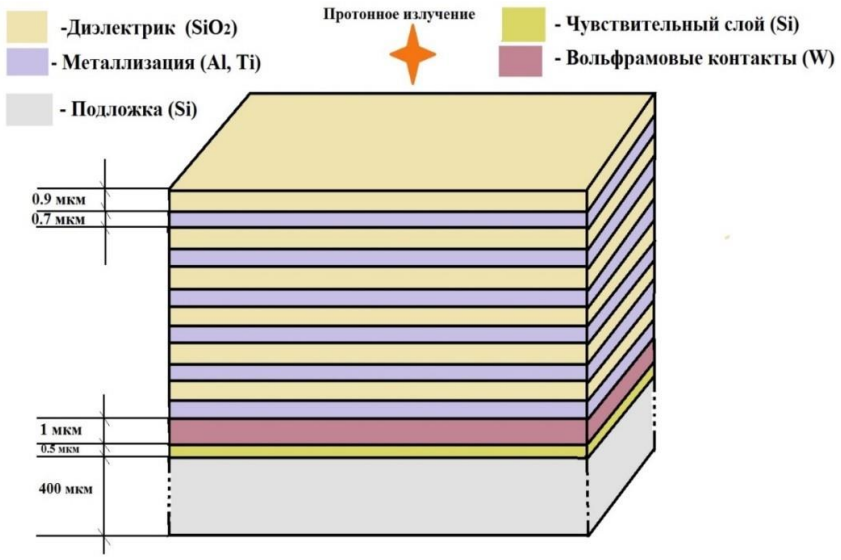


Рис. 1. Послойная структура исследуемого образца

Используя распределение ЛПЭ протона по послойной структуре для каждой энергии из заданного диапазона, было определено значение ЛПЭ и поглощенная доза в ЧО кристалла. В результате получено, что мощность дозы линейно растет с увеличением энергии лазерного излучения (ЛИ)

Верификация результатов эксперимента по протонному воздействию на ячейки памяти МК с ранее исследованной для данного типа МК реакцией на воздействие импульса тормозного излучения (ТИ) показала, что наблюдаемые сбои в ОЗУ МК не связаны с объемной ионизацией, а обусловлены одиночными радиационными эффектами.

В работе было показано, что помимо ОРЭ от первичного протонного излучения, возможно возникновение данного типа эффекта вследствие локального энерговыделения от первично выбитых протоном атомов кристалла МК.

Полученные результаты имеют практическое значение для дальнейших исследований изделий электронной техники на стойкость к протонному

воздействию и наглядно демонстрируют важность учета гетероструктур в расчетах.

1. K.P. Rodbell, D.F. Heidel, H.H.K. Tang et al., Low-energy proton-induced single-event-upsets in 65 nm node, silicon-on-insulator, latches and memory cells, IEEE Trans. Nucl.Sci. 54, 2474 (2007).

РАСЧЕТ НЕЙТРОНОВОДНОЙ СИСТЕМЫ ДЛЯ ДИФРАКТОМЕТРА НА КОМПАКТНОМ ИСТОЧНИКЕ НЕЙТРОНОВ DARIA

Матюхов В.В.[1, 2], Кравцов Е.А.[1, 2]
[1)] Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: vladimir.matyukhov@gmail.com

CALCULATION OF THE NEUTRON GUIDE SYSTEM FOR DIFFRACTOMETER ON COMPACT NEUTRON SOURCE DARIA

Matyukhov V.V.[1, 2], Kravtsov E. A.[1, 2]
[1)] M.N. Mikheev Institute of Metal Physics of UrB of RAS, Yekaterinburg, Russia
[2)] Ural Federal University n.a. the first President of Russia B.N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia

We consider operation principles and application of a diffractometer to be constructed at compact neutron source DARIA. Based on the required parameters for its operation, optimal parameters of the neutron guide were determined by numerical simulation (length & bending, neutron optics elements).

Современные тенденции в развитии нейтронных исследований конденсированных сред характеризуются резким сокращением нейтронного пучкового времени ввиду вывода из эксплуатации старых реакторов и отказом от строительства новых. Одним из путей решения проблемы считается создание компактных источников нейтронов на базе протонных ускорителей. Нейтроны на компактном источнике получают за счет низкоэнергетических реакций при бомбардировке протонами мишени, причем, при этом не производятся и используются делящиеся материалы, и установка является экологически чистой. Консорциумом из ведущих российских нейтронных центров разрабатывается проект DARIA (compact neutron source Dedicated to Academic Research and Industrial Applications) по созданию в России сети компактных источников нейтронов, пилотный проект планируется реализовать в Екатеринбурге [1]. На компактном источнике может быть установлено 1-2 мишенных сборки, на каждой из которых можно разместить до 5 различных нейтронных инструментов.

Одним из основных инструментов на планируемом к строительству в Екатеринбурге компактном источнике будет мультиспектральный дифрактометр для изучения моно- и поликристаллических материалов с использованием тепловых нейтронов. Поскольку эффективность нейтронных инструментов определяется плотностью потока нейтронов на образце, критически важным является обеспечение перемещения нейтронного потока от мишенной сборки до инструментов с использованием нейтроноводной системы с минимальными потерями.

В настоящем докладе рассматриваются особенности нейтроноводной системы, оптимизированной для реализуемой на нейтронном дифрактометре экспериментальной схеме. Приводится обзор применений дифрактометра в исследованиях материалов, общие понятия о нейтроноводах и результаты нашего расчета оптимальных параметров нейтроновода для данного дифрактометра (длина и радиус кривизны нейтроновода, и параметры используемых в нейтроноводе нейтронных оптических элементов, таких как нейтронные суперзеркала). Моделирование осуществлялось методом Монте-Карло с помощью прикладного пакета инструментов McStas.

Исследования выполнены при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Соглашения № 075-15-2022-830 от 27 мая 2022 г. (продолжение Соглашения № 075-15-2021-1358 от 12 октября 2021г).

1. К. А. Павлов, П. И. Коник, Н. А. Коваленко, Т. В. Кулевой, Д. А. Серебренников, В. В. Субботина, А. Е. Павлова, С. В. Григорьев. Компактные источники нейтронов для физики конденсированного состояния в России и мире: состояние дел и перспективы. Кристаллография, Т. 67, № 1, стр. 5-20, (2022)

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕТЕКТИРУЮЩЕЙ СИСТЕМЫ GABRIELA

Мажарцева А.А.[1], Мухин Р.С.[2]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
[2)] ОИЯИ, Дубна, Россия
E-mail: lika-2001-lika@mail.ru

MODELING OF THE GABRIELLA DETECTION SYSTEM

Mazhartseva A.A.[1], Mukhin R.S.[2]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia
[2)] JINR, Dubna, Russia

The article presents the results of computer simulation of the detection system GABRIELA in order to determine the effectiveness of the registration of the installation.

В современной науке идет активное изучение области сверхтяжелых ядер. Для изучения структуры трансурановых ядер проводится детальная альфа-, гамма- и конверсионная спектроскопия, которая возможна на установке GABRIELA в Дубне, Россия. Для дальнейшей модернизации и улучшении установки, требуется проведение ряда экспериментов. Планирование нового эксперимента, а также обработку полученных результатов могут сильно упростить результаты моделирования.

Работа посвящена моделированию детектирующей системы GABRIELA (Gamma Alpha Beta Recoil Investigations with the Electromagnetic Analyzer). Установка состоит из трех основных компонент: кремниевый детектор (DSSD), предназначенных для регистрации альфа – и бета – излучений и осколков деления, сборка из пяти германиевых clover детекторов для регистрации гамма - квантов и вакуумная камера. Рассматриваются две задачи моделирования:

1) Программная реализация экспериментальной установки
2) Определение эффективности регистрации детектора.

Была разработана программа на языке программирования C++ с использованием программного пакета Geant4 для моделирования прохождения частиц через вещество, с использованием методов Монте – Карло.

Характеристики установки, представленные с использованием инструментария моделирования Geant4 были подтверждены экспериментальными результатами. Для получения точных результатов моделирования учитывались многие детали. Отклик детектора зависит от материала, положения детектора относительно источника, а также от природы и энергии входящей частицы. Оценка эффективности детектирующей системы GABRIELA проводится путем проведения ряда симуляций с помещением гамма или электронного источника в детектор, при разной глубине имплантации. При

оценке зависимости эффективности регистрации от энергии гамма-квантов было обнаружено, что максимум кривой достигается в районе 80 - 100 кэВ и составляет около 40% и спадает с дальнейшим ростом энергии. Зависимость эффективности от глубины имплантации практически не наблюдается. Высокая эффективность регистрации гамма – квантов позволяет более точно определять альфа – гамма корреляции, что дает возможность узнать об изомерных состояниях ядра и его структуре уровней.

1. Gamma and conversion electron spectroscopy using GABRIELA, Chakma и др.(2020), The European Physical Journal A, 56(10), 245.

ВОССТАНОВЛЕНИЕ СПЕКТРОВ TKE ОСКОЛКОВ СПОНТАННОГО ДЕЛЕНИЯ

Миронова А.Е.[1], Мухин Р.С.[2]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия
E-mail: alex-sacha.01@mail.ru

RESTORATION OF THE TKE SPECTRA OF SPONTANEOUS FISSION FRAGMENTS

Mironova A.E.[1], Mukhin R.S.[2]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia
[2)] Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia

In this paper, it is proposed to use the GEANT4 package to estimate the TKE spectrum, based on modeling the passage of elementary particles through matter using Monte Carlo methods.

Изучение особенностей спонтанного деления, таких как соотношение полной кинетической энергии (TKE) для изотопов в области трансфермия, является обязательным для углубления понимания этого сложного ядерного процесса.

Известны различные подходы к оценке распределения TKE осколков деления. В частности, с использованием модели точки деления. Эта модель успешна использована при изучении деления четных изотопов сверхтяжелых элементов от Hs (Z=108) до Og (Z=118) [1]. Часто используются простые статистические подходы [2].

В данной работе предлагается для оценки спектра TKE использовать пакет GEANT4, основанный на моделировании прохождения элементарных частиц через вещество с использованием методов Монте-Карло. Метод Монте-Карло используется для создания модели многократного обсчета, на основе полученных данных вычисляются вероятностные характеристики рассматриваемого процесса.

Проведено моделирование детектирующей системы SFINXs и для оценки среднего высвобождения TKE в процессе деления скорректирован отклик детектора с учетом дефицита энергии.

1. N. Carjan, F.A. Ivanyuk, and Yu.Ts. Oganessian, Fission of super-heavy nuclei: Fragment mass distributions and their dependence on excitation energy, arXiv:1811.09913v3 [nucl-th] 22 Mar 2019
2. P. Mosat, F. P. Heßberger, S. Antalic , D. Ackermann, B. Andel , M. Block, S. Hofmann , Z. Kalaninova, B. Kindler, M. Laatiaoui, B. Lommel, A. K. Mistry J. Piot

and M. Vostinar, K isomerism in ^{255}Rf and total kinetic energy measurements for spontaneous fission of 255,256,258Rf, PHYSICAL REVIEW C 101, 034310 (2020)

МЕТОД РЕТРОСПЕКТИВНОЙ ОЦЕНКИ РАДИАЦИОННОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ УГЛЕРОДА-14 ПРИ НОРМАЛЬНОЙ ЭКСПЛУАТАЦИИ ЯДЕРНЫХ РЕАКТОРОВ

Назаров Е.И.[1], Екидин А.А.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого президента России Б. Н. Ельцина
E-mail: e.nazarov1005@gmail.com

METHOD FOR RETROSPECTIVE ASSESSMENT OF CARBON-14 EXPOSURE DURING NORMAL OPERATION OF NUCLEAR REACTORS

Nazarov E.I.[1], Ekidin A.A.[1]
[1)] Ural Federal University named after the First President of Russia B. N. Yeltsin

The report presents the results of the development of a program code that allows to carry out a retrospective assessment of ^{14}C Отсутствие результатов регулярного контроля ^{14}C в выбросах АЭС не позволяет выполнить прямуюdischarges from nuclear facilities, as well as annual effective doses.

Исследования [1] показывают, что ^{14}C является одним из основных дозообразующих радионуклидов в выбросах АЭС. Во время работы ядерного реактора ^{14}C образуется в основном в результате взаимодействия тепловых нейтронов и атомов ^{14}N, ^{13}C, ^{17}O, присутствующих в конструкционных материалах ядерного реактора, замедлителе и теплоносителе, а также за счет реакций тройного деления урана и плутония в топливе. Являясь биогенным аналогом стабильного ^{12}C, радиоуглерод проникает в органы и ткани живых организмов и включается в состав жиров, углеводов, молекул белков и генетических структур. Опасность его инкорпорирования связана с внутренним облучением молекул органических соединений и мутагенными нарушениями вследствие превращения ^{14}C в атом ^{14}N, что подчеркивает важность контроля дозовых нагрузок [2]. В 2015 г. ^{14}C был включен в перечень загрязняющих веществ, в отношении которых применяются меры государственного регулирования в области охраны окружающей среды.

Многолетние комплексные исследования стационарных источников выбросов радиоактивных веществ АЭС показали необходимость постоянного контроля поступления в атмосферу ^{14}C из систем вентиляции [3]. Непрерывный мониторинг источника выброса обеспечивает выполнение нормативов предельно допустимых выбросов радиоактивных веществ, гарантирующих соблюдение дозовых квот на население.

1. Vasyanovich M. E., Ekidin A.A., Vasilyev A.V. et. al. Determination of radionuclide composition of the Russian NPPs atmospheric releases and dose assessment to population. — J. Environ. Radioact., 2019, v. 208—209, № 106006.

2. Рублевский В.П., Яценко В.Н. Особенности радиационного и биологического действия 14C на живые организмы и опасность его накопления в биосфере Земли. — Атомная энергия, 2018, т. 125, вып. 5, с. 301—306.
3. Екидин А. А., Васянович М. Е., Васильев А. В. и др. Определение радионуклидного состава и оценка доз облучения населения за счет атмосферных выбросов российских АЭС. — Траектория исследований — человек, природа, технологии, 2022, № 2, с. 53—63.

ЦИФРОВАЯ МОДЕЛЬ ПЛОЩАДНЫХ ИСТОЧНИКОВ ВЫБРОСА РАДИОАКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ ДЛЯ ОЦЕНКИ РАДИАЦИОННОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА ПРИМЕРЕ ТЕЧЕНСКОГО КАСКАДА ВОДОЕМОВ

Назарович А.В.[1], Екидин А.А.[2], Антонов К.Л.[2], Васянович М.Е.[2], Пыхов О.А.[1]

[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

[2)] Институт промышленной экологии, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: a.v.nazarovich@mail.ru

A DIGITAL MODEL OF RADIOACTIVE SUBSTANCES RELEASE AREAL SOURCES FOR THE RADIATION IMPACT ASSESSMENT WITH TECHENSKY RESERVOIRS CASCADE AS A CASE STUDY

Nazarovich A.V.[1], Ekidin A.A.[2], Antonov K.L.[2], Vasyanovich M.E.[2], Pykhov. O.A.[1]

[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia

[2)] Institute of Industrial Ecology, Yekaterinburg, Russia

An implementation approach of naked, arbitrary shaped areal radioactive sources digital model is illustrated by means of an example of radiation impact on population and environment assessment as a result of wind uplift from contaminated area of Techensky reservoir cascade coastline.

Теченский каскад водоемов (ТКВ) – система искусственных водохранилищ для прекращения поступления радиоактивных веществ в открытую гидрографическую систему реки Теча. В настоящее время Теченский каскад водоемов представляет собой открытое поверхностное хранилище жидких радиоактивных отходов площадью 67,4 км. Теченский каскад водоемов является источником произвольной формы, состоящий из четырех водоемов (В-3, В-4, В-10, В-11). Потенциальную опасность представляет береговая линия ТКВ, с которой возможен ветровой перенос накопленной активности радиоактивных веществ. По опубликованным данным в донных отложениях ТКВ содержится до $7{,}6 \cdot 10^7$ Бк/г Cs-137 и до $4{,}2 \cdot 10^6$ Бк/г Sr-90 [1]. Цифровая модель открытого площадного источника произвольной формы для последующей оценки радиационного воздействия на население и окружающую среду реализована в программном коде. Реализованная модель использует подходы, представленные в документе ФБУ «НТЦ ЯРБ» для сценария ветрового уноса с загрязненных площадей:

- источник с единичной площадью центрирован и имеет форму квадрата со стороной 2a;

- источник центрирован, каждая его сторона перпендикулярна направлению распространения радиоактивного облака;
- использованные модели рассеивания применимы для расчета на расстояниях до 50 км [2].

В реализованной модели береговая линия ТКВ представлена в виде множества квадратных источников с единичной площадью. Модель источника содержит информацию о размере, расположению и удельной активности каждого элементарного источника. Размер источника может быть выбран исходя из условий решаемой задачи. Координаты каждого источника и их взаимное расположение получены из полигонального представления формы водоёмов с использованием открытых баз геопространственных данных. Для определения активности элементарного источника использовались значения площади осушенной части береговой линии, заключенной в элементарном источнике, и значения удельной активности радионуклидов Cs-137 и Sr-90.

На рисунке 1 представлено разбиение береговой линии на множество квадратных сегментов, распределение активности для радионуклидов на примере Cs-137 по береговой линии водоемов представлено в виде цветовой градации.

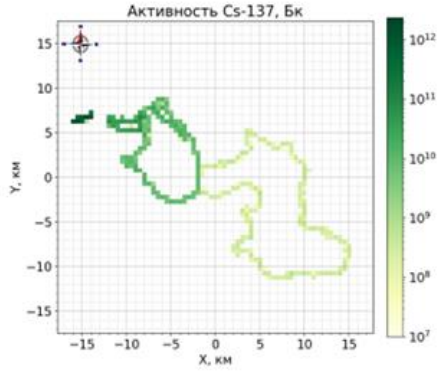


Рис. 1. Цифровая модель карты активности береговой линии ТКВ для Cs-137

Цифровая модель открытых радионуклидных площадных источников может быть использована для оценок радиационного воздействия на население и окружающую среду от ветрового переноса радиоактивных веществ с загрязненных поверхностей источников произвольной формы.

1. Мокров Ю.Г., Алексахин А.И. Деятельность ФГУП "ПО "Маяк" по обеспечению безопасной эксплуатации теченского каскада водоёмов, Вопросы радиационной безопасности,№ 4, с. 13–28 (2018)
2. Руководство по безопасности при использовании атомной энергии «Рекомендуемые методы оценки и прогнозирования радиационных последствий аварий на объектах ядерного топливного цикла» (РБ-134-17): утв. приказом Федеральной службы по экологическому, технологическому и атомному надзору от 16 окт. 2017 № 479. М.: ФБУ НТЦ ЯРБ, 2017. 39 с.

ИССЛЕДОВАНИЕ УРОВНЯ ФОНОВОГО ОБЛУЧЕНИЯ НЕЙТРОННЫМ ИЗЛУЧЕНИЕМ

Паньшин И.Д.[1], Пышкина М.Д.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
E-mail: panshin.2001@inbox.ru

INVESTIGATION OF THE LEVEL OF BACKGROUND EXPOSURE TO NEUTRON RADIATION

Panshin I.D.[1], Pyshkina M.D.[1]
[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia

In this paper we study the level of background exposure to neutron radiation.

В последнее десятилетие защита летных экипажей от земных космических лучей является одной из наиболее активно обсуждаемых проблем дозиметрии. Кроме того, все большее внимание уделяется «мягким» ошибкам полупроводниковых приборов, вызванным космическими лучами даже на уровне земли, поскольку миниатюризация устройств приводит к значительному снижению их критических зарядов. Эти радиационные эффекты вызываются преимущественно нейтронами, образующимися в результате ядерных реакций между космическими лучами и компонентами атмосферы. Таким образом, оценка спектров нейтронов космических лучей в атмосфере является важным вопросом при оценке доз облучения экипажей и коэффициентов мягких ошибок.

В данной работе предприняты попытки оценить энергетическое распределение плотности потока нейтронного излучения с помощью мультисферного спектрометра, выполненного на основе дозиметра-радиометра МКС-АТ1117М с блоком детектирования БДКН-06. Измерения проведены на крыше памятника конструктивизма «Белая башня», первом, втором этажах и крыше Института промышленной экологии, на седьмом этаже многоквартирного дома, а также в подвале многоквартирного дома. Результаты данной работы дадут понятие об уровне фонового воздействия нейтронного излучения, образованного под действием космического излучения на территории города Екатеринбурга.

1. https://www.studmed.ru/view/kolevatov-yui-semenov-vp-trykov-la-spektrometriya-neytronov-i-gamma-izlucheniya-v-radiacionnoy-fizike_73b217a7ed0.html

РАСЧЕТ НЕЙТРОНОВОДНОЙ СИСТЕМЫ ДЛЯ РЕФЛЕКТОМЕТРА НА КОМПАКТНОМ ИСТОЧНИКЕ НЕЙТРОНОВ DARIA

Попов А.И.[1, 2], Кравцов Е.А.[1, 2]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: 79126678476@mail.ru

DESIGN OF NEUTRON GUIDE FOR A REFLECTOMETER ON COMPACT NEUTRON SOURCE DARIA

Popov A.I.[1, 2], Kravtsov E. A.[1, 2]
[1)] Ural Federal University n.a. the first President of Russia B.N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia
[2)] M.N. Mikheev Institute of Metal Physics of UrB of RAS, Yekaterinburg, Russia

This report will present the concept of a neutron-guide system for a reflectometer to be constructed on compact neutron source DARIA. The principles of construction of neutron-guide and its features related to the reflectometer will be shown. Optimal parameters of the neutron guide were determined.

Современные тенденции в нейтронной физике состоят в выводе из эксплуатации среднепоточных нейтронных реакторов и строительстве вместо них крайне ограниченного числа высокопоточных источников нейтронов. Пучковое время на этих реакторах будет крайне ограничено и, скорее всего, будет предполагать проведение исключительно уникальных экспериментов. Большинство задач в исследованиях конденсированных сред не требуют таких больших потоков нейтронов и решаются на среднепоточных реакторах. Выходом является строительство компактных источников нейтронов, в которых за счет оптимизации небольшого числа инструментов можно добиться тех же потоков нейтронов, как и на среднепоточных реакторах.

Нейтроны на компактном источнике получают за счет низкоэнергетических реакций при бомбардировке протонами мишени, причем, при этом не производятся и используются делящиеся материалы, и установка является экологически чистой. Консорциумом из ведущих российских нейтронных центров разрабатывается проект DARIA (compact neutron source Dedicated to Academic Research and Industrial Applications) по созданию в России сети компактных источников нейтронов, пилотный проект планируется реализовать в Екатеринбурге [1]. Строительство прототипа компактного источника нейтронов DARIA является одной из приоритетных целей для развития различных сфер науки и техники в области физики твердого тела на Урале. На компактном источнике может быть установлено 1-2 мишенных сборки, до 5 различных нейтронных инструментов на каждой.

Одним из основных инструментов на планируемом к строительству в Екатеринбурге компактном источнике будет нейтронный рефлектометр для изучения планарных мнгослойных наноструктур, поверхностей и межслойных границ. Поскольку эффективность нейтронных инструментов определяется плотностью потока нейтронов на образце, критически важным является обеспечение перемещения нейтронного потока от мишенной сборки до инструментов с использованием нейтроноводной системы с минимальными потерями.

В настоящем докладе рассматриваются особенности нейтроноводной системы, оптимизированной для реализуемой на нейтронном рефлектометре экспериментальной схеме, предполагающей использование холодных нейтронов с большими длинами волн. Приводится результаты нашего расчета оптимальных параметров нейтроновода для данного рефлектометра (длина и радиус кривизны нейтроновода, и параметры используемых в нейтроноводе нейтронных оптических элементов, таких как нейтронные суперзеркала).

Исследования выполнены при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Соглашения № 075-15-2022-830 от 27 мая 2022 г. (продолжение Соглашения № 075-15-2021-1358 от 12 октября 2021г).

1. К. А. Павлов, П. И. Коник, Н. А. Коваленко, Т. В. Кулевой, Д. А. Серебренников, В. В. Субботина, А. Е. Павлова, С. В. Григорьев. Компактные источники нейтронов для физики конденсированного состояния в России и мире: состояние дел и перспективы. Кристаллография, 2022, Т. 67, № 1, стр. 5-20.

ИЗМЕРЕНИЕ РАДИАЦИОННОГО ФОНА Д. НИЖНЯЯ ИЛЕНКА БАЙКАЛОВСКОГО РАЙОНА СВЕРДЛОВСКОЙ ОБЛАСТИ

Сабанин К.А.[1], Екидин А.А.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Российская Федерация
E-mail: sabanin13.05.00@mail.ru

MEASUREMENT OF RADIATION BACKGROUND IN THE VILLAGE OF NIZHNYAYA ILENKA, BAIKALOVSKY DISTRICT, SVERDLOVSK REGION

Sabanin K.A.[1], Ekidin A.A.[1]
[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia B. N. Yeltsin, Ekaterinburg, The Russian Federation

A study of the gamma radiation dose rate in the village of Nizhnyaya Ilenka, Baikalovsky District, Sverdlovsk Region was conducted. The ambient equivalent dose rate does not exceed 0.13 μSv/h, no sites with elevated natural background radiation were found.

Ядерная и радиационная безопасность является одной из важнейших составляющих национальной безопасности Российской Федерации [1]. Необходимо производить контроль и учет индивидуальных доз излучения, обусловленных в том числе естественным радиационным и техногенно измененным радиационным фоном. При планировании и проведении мероприятий органами государственной власти, органами местного самоуправления, проводится оценка радиационной безопасности с учетом анализа доз облучения, получаемых отдельными группами населения от всех источников ионизирующего излучения [2].

В связи с этим проведено исследование мощности дозы гамма-излучения в д. Нижняя Иленка Байкаловского района Свердловской области, населенный пункт удален от радиоактивно- опасных объектов на расстоянии не менее 180 км. Внешнее облучение населения формируется за счет космического излучения и излучения от поверхности почв, грунтов, строительных конструкций за счет естественных радионуклидов и глобальных выпадений искусственных радиоизотопов.

Измерения проводились дозиметром RadiaCode 101 со сцинтиляционным детектором. Получены данные мощности дозы на открытом пространстве улиц населенного пункта, нескольких жилых зданий и социальных объектах. Значения МАЭД на улицах находятся в диапазоне от 0,04 мкЗв/ч до 0,08 мкЗв/ч. В зданиях МАЭД достигает 0,13 мкЗв/ч. За счет внешнего облучения годовая эффективная доза населения может составить от 0,35 до 1,14 мЗв/год. Согласно [2] годовой

предел дозы для населения составляет 1 мЗв/год в среднем за любые последовательные 5 лет, но не более 5 мЗв/год.

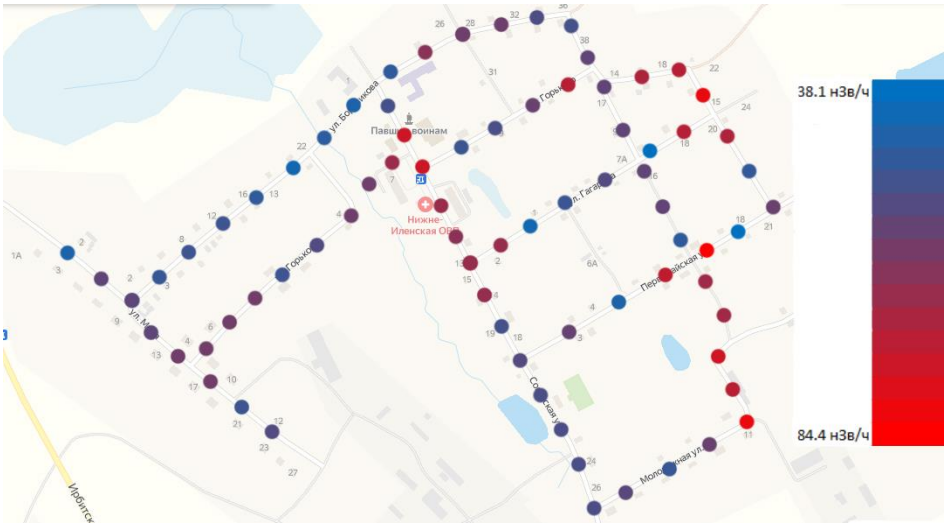


Рис. 1. Карта населенного пункта с указанием точек измерений, значение МАЭД изображено в виде тепловой карты.

Вывод: Впервые проведено исследование радиационной обстановки в д. Нижняя Иленка Байкаловского района Свердловской области. Радиационная обстановка благоприятная, участков с повышенным естественным радиационным фоном не обнаружено.

1. Президента РФ от 13 октября 2018 г. N 585 "Об утверждении Основ государственной политики в области обеспечения ядерной и радиационной безопасности Российской Федерации на период до 2025 года и дальнейшую перспективу"
2. Санитарные правила СанПиН 2.6.1.2523-09 "Нормы радиационной безопасности (НРБ-99/2009)"

УЛУЧШЕНИЕ РАДИАЦИОННО-ЗАЩИТНЫХ СВОЙСТВ ДИАМИТОВЫХ ГЛИНИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ДАВЛЕНИЯ

Широнина А.М.[1], Воронин И.П.[1], Бодуленко С.Е.[1], Махмуд К.Г.[1], Ташлыков О.Л.[1]
[1)] Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: shironina-03@mail.ru

IMPROVEMENT OF RADIATION-PROTECTIVE PROPERTIES OF DIAMITE CLAY MATERIALS UNDER PRESSURE

Shironina A.M.[1], Voronin I.P.[1], Bodulenko S.E.[1], Mahmoud K.G.[1], Tashlykov O.L.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The results of experimental studies of the effect of pressure in manufacturing on the radiation-protective properties of diatomite clay minerals are presented.

Экранирование источника ионизирующего излучения является одним из основных методов воздействия на радиационный параметр, однако выбор экранирующих материалов ограничен. В настоящее время во многих странах, особенно в тех, где планируется сооружение объектов использования атомной энергии, проводятся теоретические и экспериментальные исследования в области оптимизации и поиска новых нетоксичных составов радиационно-защитных материалов [1].

Диатомит представляет собой природный глинистый материал, широко распространенный во всем мире, который характеризуется как материал с низкой плотностью. Поэтому его способность ослаблять фотоны высокой энергии невелика. Целью данной работы является повышение экранирующей способности диатомитовых глинистых минералов по отношению к гамма-излучению за счет увеличения плотности образцов с помощью пресса.

Рис. 1. Образцы, полученные при разных давлениях прессования

Была исследована диатомитовая глина с добавлением 15% жидкого стекла (Na_2SiO_3) для повышения устойчивости к растрескиванию конечного материала. Диатомитовую глину подвергали прессованию под давлением в диапазоне 22,84 - 114,24 МПа для повышения ее плотности. Из каждого замеса были изготовлены три образца различной толщины для экспериментального определения ослабляющих свойств по отношению к гамма-излучению различных энергий.

Плотность прессованных образцов измеряли с помощью плотномера МН-300А. В ходе исследования была построена зависимость плотности материала от приложенного давления. Экспериментально были определены линейные коэффициенты ослабления для каждого образца.

1. Mahmoud, K.A., Tashlykov, O.L., El Wakil, A.F., El Aassy, I.E. Aggregates grain size and press rate dependence of the shielding parameters for some concretes // Progress in Nuclear Energy. Vol. 118, 2020, 103092. https://doi.org/10.1016/j.pnucene.2019.103092

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ И УГЛОВОЙ ЗАВИСИМОСТЕЙ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ НЕЙТРОННЫХ ДОЗИМЕТРОВ

Спиридонова И.С.[1]
[1)] Уральский федеральный университет, Екатеринбург
E-mail: irishkaspiridonova13@gmail.com

SIMULATION OF ENERGY AND ANGULAR RESPONSE OF INDIVIDUAL NEUTRON DOSIMETERS

Spiridonova I.S.[1]
[1)] UrFU, Ekaterinburg

Modern individual dosimeters do not provide an adequate assessment of the values of the radiation entering them. To obtain a more accurate estimate, it is necessary to study the energy and angular dependences of the sensitivity of neutron dosimeters.

В дозиметрии нейтронного излучения до сих пор остается множество сложных и нерешенных задач. Современные индивидуальные дозиметры не дают адекватной оценки значений попадающего в них излучения. Показания отличаются от эффективной дозы индивидуального дозиметра (ИД) при рассмотрении переднезадней геометрии. В тех. паспортах ИД для других направлений излучения показания указаны либо для определенных значений энергии, либо не указаны вовсе.

Изучение геометрии облучения путем моделирования позволяет создать полноценную картину взаимодействия нейтронного поля с объектом изучения без вреда для здоровья, т.к. нет прямого контакта с самим излучением. Также с помощью моделирования появляется возможность не только создать любую картину, объект или комнату, необходимые для изучения, но и внести какие-либо изменения в энергию подающегося излучения, расположение дозиметра и самого фантома, что, в большинстве случаев, на практике осуществить трудно или невозможно.

Наиболее точные оценки эффективной дозы при воздействии нейтронного излучения могут быть получены с использованием информации о энергетическом и угловом распределении нейтронов, а также информации об энергетической и угловой зависимости чувствительности ИД.

В работе представлены результаты моделирования по определению энергетических и угловых зависимостей чувствительностей индивидуальных нейтронных термолюминесцентных дозиметров Harshaw и ДВГН-01.

РАДИОЭКОЛОГИЧЕСКИЙ МОНИТОРИНГ ПОЧВ Г. ЕКАТЕРИНБУРГА

Султанова У.А.[1], Воронина А.В.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: koteika770@gmail.com

RADIOECOLOGICAL MONITORING OF YEKATERINBURG SOILS

Sultanova Y.A.[1], Voronina A.V.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

In this research work, radioecological monitoring of the soils of Yekaterinburg was carried out. Sampling was done in the places of influence of the East Chernobyl trace. Studies have shown the content of cesium-137 and radium-226 in soils.

Екатеринбург находится в зоне влияния различных по генезису радиационных воздействий. На Свердловскую область (40-50 градус северной широты) пришелся максимум выпадений после испытаний ядерного оружия на полигоне Новая Земля. После аварии на Чернобыльской АЭС в 1986 году в результате выпадений на территории Европейской части России образовался Восточно-Чернобыльский радиоактивный след. В пределах следа поверхностное загрязнение территории составляло 7,5 ГБк/км^2, а в пятнах - до 18-37 ГБк/км^2. Прохождение радиоактивного облака над Свердловской областью сопровождалось выпадением осадков в виде дождя и снега. След частично прошёл по более раннему Восточно-Уральскому радиоактивному следу. Поверхностное загрязнение ^{137}Cs лесных почв в районе ст. Исеть, южнее Верх-Исетского пруда, составило 10^{-15} ГБк/км^2 [1].

Название пробы	**Координаты места отбора проб**	**Активность, Бк/кг**		
		^{137}Cs	**^{40}K**	**^{226}Ra**
Шарташ 1	56.848524 60.690389	26,7±0,5	620±9	39,0±0,7
Шарташ 2	56.849534 60.716087	-	525±8	30±4
Исеть 3	56.776095 60.678255	-	304±4	8,6±0,2
Исеть 4	56.757750 60.694645	16,9±0,4	65±3	-
Исеть 5	56.756836 60.676197	37,2±0,7	115±5	-

Рис. 1. Удельная активность проб почв

На территории г. Екатеринбурга было зафиксировано 199 участков радиоактивного загрязнения с мощностью экспозиционной дозы более 0,6 мкЗв/ч, 66% из которых приурочено к жилым кварталам города. Среди всех обнаруженных радиационных пятен 66,3% явилось следствием аварии на Чернобыльской АЭС. При этом в г. Екатеринбурге не проводится регулярный радиоэкологический мониторинг.

В работе проведён анализ радиоактивности почв, отобранных на территории г. Екатеринбурга в зонах влияния Восточно-Чернобыльского радиоактивного следа. Пробы почв отбирали методом конверта вблизи озера Шарташ и Нижне-Исетского пруда. Измерения воздушно-сухих проб после пробоподготовки проводили в сосуде Маринелли на сцинтилляционном гамма-бета-спектрометре МКС-АТ1315. На рисунке 1 приведена удельная активность проб почв.

Гамма-активность почв преимущественно обусловлена природным радионуклидом ^{40}K, в трёх пробах также присутствует ^{226}Ra. Искусственный радионуклид ^{137}Cs обнаружен в 3 исследованных пробах. Максимальное содержание 37,2±0,7 Бк/кг определено в пробе почвы, отобранной на правом берегу Нижне-Исетского пруда. Полученные результаты указывают на необходимость организации постоянно действующего радиационного мониторинга в таких крупных промышленно развитых городах, каким является г. Екатеринбург.

Хочу выразить благодарность своему научному руководителю, Анне Владимировне Ворониной, за помощь в проведённом исследовании.

1. Давыдов А. В., Игумнов С. А., Талалай А. Г., Уткин В. И, Фоминых В. И, Хайкович И. М. Радиоэкология. Екатеринбург: Ин-т испыт. мин. сырья УГГА, 2000. 351 с.

РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ ДЕЗАКТИВАЦИИ ТРУБОПРОВОДОВ АЭС

Сурганов О.А.[1], Сергеев А.Н.[1], Шастин А.Г.[1], Щеклеин С.Е.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: oleg30400@mail.ru

DEVELOPMENT OF THE TECHNOLOGY FOR DECONTAMINATION OF NPP PIPELINES

Surganov O.A.[1], Sergeev A.N.[1], Shastin A.G.[1], Shcheklein S.E.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

One of the problems that arise during the decommissioning of channel-type nuclear power plants is the large number of radioactive steam-water channels to be dismantled. The article describes the technology for efficient and safe decontamination of nuclear power plant pipelines.

На сегодняшний день на площадках российских АЭС находятся в разных стадиях подготовки к выводу из эксплуатации 17 энергоблоков с уран-графитовыми реакторами канального типа. За долгие годы эксплуатации внутренние стенки пароводяных каналов данных реакторов обрастают коррозионными отложениями, в которых концентрируются радиоактивные загрязнения. Для снижения воздействия ионизирующего излучения на персонал, занимающийся в процессе вывода из эксплуатации энергоблока демонтажем радиоактивных трубопроводов, а также для повышения количества направляемого на повторное использование конструкционного металла необходимо проводить предварительную дезактивацию пароводяных контуров. Применяемые в настоящее время для этих целей технологии требуют частичного демонтажа оборудования и приводят к образованию значительного количества вторичных жидких радиоактивных отходов (ЖРО), обращение с которыми требует больших экономических затрат.

Для решения указанных проблем разработана технология абразивно-ультразвуковой дезактивации с применением отверждаемых растворов. Данная технология подразумевает ультразвуковое воздействие на дезактивируемый трубопровод с одновременной прокачкой через него водного раствора с добавлением сорбирующих и абразивных компонентов. Образующееся при облучении ультразвуком явление кавитации увеличивает эффективность абразивного воздействия на очищаемую поверхность, а наличие в растворе сорбента позволяет фиксировать уносимые со стенок радионуклиды для их последующей иммобилизации в отвержденную матрицу. Проведенные эксперименты по гидроабразивной очистке металлических поверхностей,

покрытых коррозионными отложениями, показали, что наилучшей эффективности дезактивации можно добиться, применяя в качестве абразива купершлак или алунд. Наблюдаемая при сорокакратном увеличении микроструктура очищенных данными компонентами образцов не содержала окалины и ржавчины. Дополнительно к раствору необходимо добавлять диатомит, имеющий высокие сорбционные способности [1]. После дезактивации излишки воды отделяются от суспензии (например, с помощью центрифуги). В полученную смесь добавляется фосфорная кислота, которая вместе с диатомитом при последующей формовке и сушке становится основой керамической матрицы для хранения радиоактивных отходов. Полученные омоноличенные формы ЖРО имеют меньшие объемы и большую стойкость к воздействию ионизирующего излучения, чем цементные матрицы.

Подводя итоги, можно заключить, что предлагаемая технология способна существенно упростить цепочку операций по дезактивации трубопроводов АЭС, снизить дозовые нагрузки на персонал и снизить затраты на обращение с вторичными ЖРО. Дальнейшее развитие данной технологии будет связано с подбором оптимальных параметров ультразвукового облучения трубопроводов, а также с подтверждением соответствия получаемых керамических матриц критериям приемлемости для захоронения.

1. Белоусов П.Е., Милютин В.В., Крупская В.В., Зеленин П.Г. Использование природных сорбентов для очистки радиоактивно-загрязненных растворов. Новое в познании процессов рудообразования, ИГЕМ РАН (61-62, 2018)
2. Аксенов В.И., Кадников А.А., Шастин А.Г. и др. Новые способы применения ультразвука для дезактивации оборудования ЯЭУ. Вопросы радиационной безопасности (1, 10-15, 2012)
3. Пат. 2505872 Российская Федерация, МПК G 21 F 9/28. Способ дезактивации труб и трубных пучков — кислотно-абразивная дезактивация/ Аксенов В.А., Кадников А.А., Минаев В.И., Шастин А.Г., Щеклеин С.Е.. ; патентообладатель ОАО “Атомэнергоремонт”; заявл. 24.10.2011, опубл. 27.01.2014

РЕШЕНИЕ ПРОБЛЕМЫ ПЕРЕВОДА ЯДЕРНОГО РЕАКТОРА В ПОДКРИТИЧЕСКИЙ РЕЖИМ МЕТОДОМ МАРКОВСКОЙ ЦЕПИ

Ваулин Г.Е.[1], Метельникова М.А.[1], Ошканов Н.Н.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Ельцина Б. Н., Екатеринбург, Российская Федерация
E-mail: dedmorozxxx.ser@yandex.ru

SOLVING THE PROBLEM OF TRANSFERRING A NUCLEAR REACTOR INTO A SUBCRITICAL MODE BY THE MARKOV CHAIN METHOD

Vaulin G.E.[1], Metelnikova M.A.[1], Oshkanov N.N.[1]
[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia Eltsin B. N., Ekaterinburg, Russian Federation

It is established that a nuclear chain reaction corresponds to a Markov chain. According to it, the fast emergency protection of any reactivity does not put the reactor into a subcritical state, and this additionally requires parallel operation of the slow reactivity input system.

Целью исследования является изучение поведения мощности ядерного реактора при ступенчатом вводе большой отрицательной реактивности аварийной защиты реактора.

Анализ кинетики последовательности циклов цепной ядерной реакции (ЦЯР) показал [1], что её уравнение кинетики является произведением выходных плотностей нейтронов цепи следующих друг за другом циклов ЦЯР, каждый из которых запускает ЦЯР в последующем цикле. Это соответствует Марковской цепи последовательных событий.

Проведён численный эксперимент по вводу большой реактивности в активную зону реактора с решением уравнения Марковской кинетики и сравнением его с решением уравнений классической кинетики [2]. Результаты расчёта приведены на Рис. 1, в котором кривая 1 соответствует Марковской кинетике, кривая 2 соответствует классической кинетике.

Вследствие отрицательности скачка реактивности реактор переходит в подкритический режим снижения мощности затухающей ЦЯР.

Согласно Марковской кинетике спад общей плотности нейтронов 1 определяется спадом мгновенных нейтронов 3, которые постепенно замещается запаздывающими нейтронами 4 вследствие медленного распада избытка предшественников. Постепенно, по мере сравнивания скоростей распада предшественников и снижения общей плотности нейтронов, затухание ЦЯР прекращается и формируется постоянно действующая вторичная ЦЯР на запаздывающих нейтронах предшественников исходного состояния реактора.

Таким образом, быстрая аварийная защита оказывается не в состоянии прекратить ЦЯР.

Согласно классической кинетике снижение общей относительной плотности нейтронов 2 до момента перехода вторичной ЦЯР в стационарный режим совпадает с Марковской кинетикой, но далее продолжает снижаться, а не стабилизироваться. Это постулируется классической кинетикой как результат постепенного распада избытка предшественников. Таким образом, классическая кинетика не предсказывает образование вторичной ЦЯР.

Очевидно, что реактор должен иметь дополнительную систему для подавления ЦЯР после работы аварийной защиты. Ею может являться система компенсации выгорания топлива, которая одновременно с аварийной защитой осуществляет медленный ввод реактивности. Численный эксперимент по оценке методом Марковской кинетики влияния на ЦЯР аварийной защиты и параллельно с ней медленной системы, показал, что такой ввод реактивностей переводит реактор в подкритическое состояние.

Таким образом, действие быстрой аварийной защиты реактора переводит его только на уровень мощности вторичной ЦЯР на запаздывающих нейтронах, образуемых предшественниками исходного режима реактора. Достижение подкритического состояния реактора автоматически осуществляет медленная система компенсации выгорания, включаемая в работу одновременно с аварийной защитой.

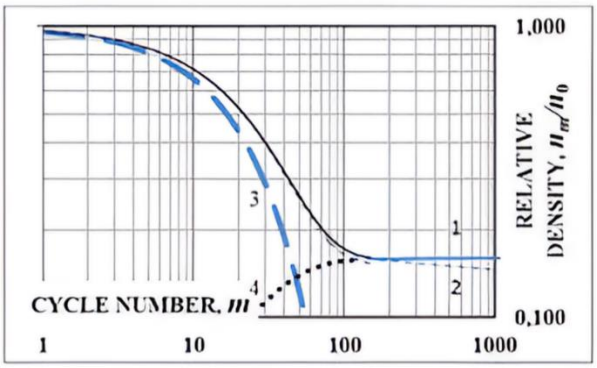


Рис. 1. Поведение относительной плотности нейтронов после ввода реактивности -5,5β в урановую активную зону реактора.

1. On nonconformity of the classical reactor kinetics to physics of a chain reaction /, N. N. Oshkanov. Proceedings of SGEM 2018, vol. 4.1, pp. 31-45.
2. Хетрик Д. Динамика ядерных реакторов / Д. Хетрик, Москва :Атомиздат, 1975. 400 с.
3. Селезнев Е. Ф. Кинетика реакторов на быстрых нейтронах /Е. Ф. Селезнев; – Москва: Наука, 2013. – 250 с.
4. Белл Дж. И. Хетрик Теория ядерных реакторов / Дж. И. Белл, С. Глестон. – Москва : Атомиздат, 1974. 460 с.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИТОВ В СРЕДСТВАХ ПЕРСОНАЛЬНОЙ РАДИАЦИОННОЙ ЗАЩИТЫ

Воложенинов Т.П.[1], Касков Д.О.[1], Ташлыков О.Л.[1], Юзбашиева К.Ш.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: t.volozheninov@yandex.ru

THE USE OF POLYMER COMPOSITES IN PERSONAL RADIATION PROTECTION EQUIPMENT

Volozheninov T.P.[1], Kaskov D.O.[1], Tashlykov O.L.[1], Iuzbashieva K.S.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The study proposes technical solutions to improve the radiation-shielding properties of the radiation-protective kit (RPC) which is used in the Ministry of Emergency Situations of Russia by introducing additional elements with shielding plates made of polymer matrices with fillers of bismuth oxide.

Ликвидация последствий чрезвычайных ситуаций на АЭС и других радиационно-опасных объектах неизбежно связана с работой человека в условиях комбинированного радиационного излучения. Для индивидуальной комплексной защиты человека при тушении пожаров и проведении аварийно-спасательных работ в зоне сочетанного бета-гамма облучения, в том числе при пожарах и авариях на ядерных реакторах в настоящее время используется радиационно-защитный комплект для пожарных (РЗК) [1].

В последнее время учеными многих стран исследуются альтернативные радиационно-защитные материалы, в частности, полимерные композиты. Они имеют ряд преимуществ перед традиционными экранирующими материалами (например, свинцом), в частности, гибкость, легкость, дешевизна и возможность варьирования концентрации наполнителя [2]. Вышеперечисленные свойства обуславливают их возможное применение в области индивидуальной радиационной защиты.

В данной работе предложено улучшение экранирующих свойств комплекта РЗК при помощи интеграции дополнительных элементов, содержащих полимерные композиты с наполнителями из оксида висмута (Bi_2O_3) в полиуретановой матрице. Опираясь на данные о наиболее уязвимых к ионизирующему излучению органах человеческого тела, созданы эскизы внедряемых в РЗК элементов – экранирующего нательного жилета, фрагментов защиты тазового отдела и ног. Для анализа изготовлены образцы полимеров с наполнителем в различных концентрациях, при помощи денсиметра измерена плотность каждого образца. Используя моделирование методом Монте-Карло, получены радиационно-защитные свойства выбранных композитов для бета- и

гамма-излучения изотопов Sr^{90} и Co^{57}. Рассчитано безопасное время нахождения человека в зоне сочетанного бета-гамма излучения в зависимости от мощности дозы. Проведен сравнительный анализ различных вариантов модификации.

1. РАДИАЦИОННО-ЗАЩИТНЫЙ КОМПЛЕКТ ДЛЯ ПОЖАРНЫХ РЗК Руководство по эксплуатации, техническое описание, паспорт РЭ 8570-047-38996367-2004.
2. Русских И.М. Экспериментально-теоретическое исследование органометаллических радиационно-защитных материалов, адаптированных к источникам излучения со сложным изотопным составом / Русских И.М. [и др.] // Ядерная физика и инжиниринг, –2014, –том 5, –№5, –с.449-455.

КОНСЕРВАТИВНАЯ ОЦЕНКА АКТИВНОСТИ ПЫЛИ В НАСЕЛЕННОМ ПУНКТЕ

Яковлев А.С.[1], Екидин А.А.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Российская Федерация
E-mail: alexand.2001@mail.ru

CONSERVATIVE ASSESSMENT OF DUST ACTIVITY IN A LOCALITY

Yakovlev A.S.[1], Ekidin A.A.[1]
[1)] Ural Federal University named after the First President of Russia B.N. Yeltsin, Ekaterinburg, Russian Federation

Assessment of consistency of regulatory requirements in field of limiting atmospheric air pollution with chemicals and radioactive substances has been carried out. 10 radionuclides with maximum value of calculated volumetric activity were determined in compliance with standards of air dustiness.

Для определения степени загрязненности используют различные методики. Однако, есть необходимость быстрого оценивания загрязненности по определенному радионуклидному составу. Особое место занимает определение загрязненности в населенном пункте. Быстрая оценка загрязненности населенных пунктов при нештатных и аварийных ситуациях на объектах использования атомной энергии позволит ускорить принятия важных решений по безопасности населения.

Исходя из этого была поставлена цель провести консервативную оценку активности пыли в населенном пункте.

Рассмотрим содержание пыли в населенном пункте. Для этого были отобраны 6 нормируемых вещества и их предельно допустимые концентрации (ПДК) из документа [1].

Для проведения оценки было сделано следующее предположение: пусть загрязняющего вещества имеет активность на единицу массы равную минимально значимой удельной активности (МЗУА) некоторого радионуклида. Тогда объемную активность (ОА) данного вещества для данного радионуклида можно рассчитать по следующей формуле:

$$ОА=ПДК\times МЗУА$$

Сравнивая полученное значение со среднегодовой допустимой объемной активности (ДОА), можно получить оценку – выполняется ли нормативное содержание радионуклида. Радионуклиды, их МЗУА и ДОА взяты из [2].

По ранее предложенной формуле проведем расчёт для каждого вещества. Найдем отношение ОА к ДОА. Значение больше 1 (100%) говорит о превышении норма по уровню загрязнённости данного радионуклида.

По полученным результатам можно говорить, что в рамках заданного предположения нет превышения ОА над ДОА, то есть нормы радиационной безопасности выполняются.

Среди отобранных ранее веществ наибольшее значение ПДК имеет пыль неорганическая, содержащая двуокись кремния менее 20%. Отобраны для нее десять радионуклидов с наибольшим значением отношения ОА к ДОА: Ra-223, Ra-225, Th-228, Pu-236, Cm-242, Cm-244, Cf-246, Cf-250, Cf-252, Es-253.

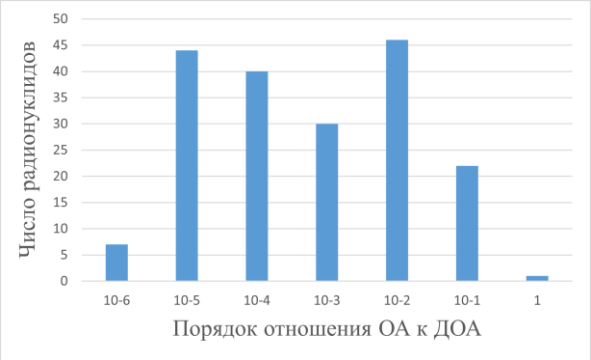


Рис. 1. Количественное распределение радионуклидов по порядку отношения ОА к ДОА

Выводы:

1. Проведена консервативная оценка объемной активности пыли в населенном пункте. Для расчётов использованы значения МЗУА радионуклида и ПДК пылевого загрязнения.
2. Одновременное соблюдение ПДК и МЗУА обеспечивает выполнение требований по не превышению ДОА для населения.
3. При оценке загрязненности населенного пункта необходимо обратить важное внимание для десяти изотопов с набольшими значениями отношения ОА к ДОА, если возможно их появление.
4. Полученные результаты могут быть использованы для оценки загрязненности населенного пункта, который может быть подвержен влиянию нештатных и аварийных ситуаций на объектах использования атомной энергии.

1. Постановление Главного государственного санитарного врача Российской Федерации от 28.01.2021 № 3 "Об утверждении санитарных правил и норм СанПиН 2.1.3684-21 "Санитарно-эпидемиологические требования к содержанию территорий городских и сельских поселений, к водным объектам, питьевой воде и питьевому водоснабжению, атмосферному воздуху, почвам, жилым помещениям, эксплуатации производственных, общественных помещений, организации и проведению санитарно- противоэпидемических (профилактических) мероприятий".
2. Санитарные правила СанПиН 2.6.1.2523-09 "Нормы радиационной безопасности (НРБ-99/2009)".

РАЗРАБОТКА МУЛЬТИСФЕРНОГО СПЕКТРОМЕТРА НЕЙТРОНОВ, ЧУВСТВИТЕЛЬНОГО К УГЛУ ПАДЕНИЯ ИЗЛУЧЕНИЯ

Юмагуен Р.Р.[1], Пышкина М.Д.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина
E-mail: rishatyrr@gmail.com

DEVELOPMENT OF A MULTISPHERE NEUTRON SPECTROMETER SENSITIVE TO THE ANGLE OF INCIDENCE OF RADIATION

Yumaguen R.R.[1], Pyshkina M.D.[1]
[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin

Modern spectrometers do not provide an adequate assessment of neutron radiation. To obtain a more accurate radiation spectrum, it is necessary to take into account and be able to change the angle of incidence of the radiation.

Наиболее удобным в использовании спектрометром нейтронного излучения с точки зрения радиационной безопасности является мультисферный спектрометр Боннера. Несмотря на высокую мобильность прибора, простоту его использования и достаточную точность получаемых результатов, у данного прибора имеются и недостатки: невозможность оценить энергетическое распределение плотности потока нейтронного излучения при падении с разных углов. Учет углового распределения плотности потока нейтронного излучения может вносить существенный вклад в формировании уровней облучения персонала на объектах использования атомной энергии, поскольку на рабочих местах персонала присутствует большое количество рассеянного нейтронного излучения.

В настоящей работе представлена оригинальная идея модификации разработанного мультисферного спектрометра на базе прибора МКС-АТ1117М с блоком БДКН-06, позволяющая проводить измерения энергетического распределения плотности потока нейтронного излучения в зависимости от угла падения излучения.

В рамках работы проведено моделирование энергетической и угловой зависимости чувствительности мультисферного спектрометра Боннера, с размещенной внутри сферы, но на поверхности детектора кадмиевого экрана со щелью. Разработана методика определения энергетического распределения плотности потока нейтронного излучения в зависимости от угла падения излучения. Проведено экспериментальное подтверждение работы модифицированного прибора и методики измерения.

1. https://www.studmed.ru/view/kolevatov-yui-semenov-vp-trykov-la-spektrometriya-neytronov-i-gamma-izlucheniya-v-radiacionnoy-fizike_73b217a7ed0.html

ОЦЕНКА РАДИАЦИОННЫХ РИСКОВ НА ТЕРРИТОРИЯХ С ПОВЫШЕННЫМ СОДЕРЖАНИЕМ ТЕХНОГЕННЫХ РАДИОНУКЛИДОВ

Зигангиров А.Р.[1], Марчук М.В.[1], Екидин А.А.[2]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Институт промышленной экологии, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: handsupbabyhandsup@yandex.ru

RADIATION RISKS ASSESSMENT IN TERRITORIES WITH INCREASED CONTENT OF TECHNOGENIC RADIONUCLIDES

Zigangirov A.R.[1], Marchuk M.V.[1], Ekidin A.A.[2]
[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia
[2)] Institute of Industrial Ecology, Yekaterinburg, Russia

The article assesses radiation risks in the publicly accessible territory exposed to radioactive contamination. The following ways of irradiation are considered: irradiation from the soil surface and irradiation due to ingestion with food; irradiation due to radionuclides wind uplift from the soil.

В результате ряда радиационных инцидентов обширная территория на севере Челябинской области подверглась радиационному загрязнению. Кыштымская авария 1957 г. привела к выбросу в окружающую среду 20 МКи радиоактивных веществ, при этом около 2 МКи было поднято в воздух и в дальнейшем осело на прилегающей территории, образовав Восточно-Уральский радиоактивный след (ВУРС) [1]. Карачаевский инцидент 1967 г., в результате которого в окружающую среду попало 600 Ки радиоактивных веществ также оказал влияние на радиационную обстановку региона. В обоих случаях радиоактивные вещества содержали радионуклиды ^{90}Sr и ^{137}Cs. С целью недопущения свободного проникновения населения на наиболее загрязненную территорию в 1966 в головной части ВУРСа был учрежден Восточно-Уральский государственный заповедник (ВУГЗ) площадью в 166 км^2.

На общественно-доступных территориях, примыкающих к ВУГЗу и по сей день, отмечаются повышенные уровни содержания техногенных радионуклидов в элементах окружающей среды [2]. Содержащиеся в почве радионуклиды приводят к внешнему облучению лиц, находящихся на данной территории. Миграция нуклидов из почвы в растительность приводит к их накоплению в пище как растительного, так и животного происхождения, что в дальнейшем приводит к внутреннему облучению организма человека. Также радионуклиды могут переходить из поверхностного слоя почвы в воздух в результате ветровых нагрузок или некоторых аварийных ситуаций, таких как пожар.

Возникает вопрос о безопасности пребывания людей на территориях с содержанием техногенных радионуклидов в элементах окружающей среды выше глобального уровня. В данной работе рассматриваются радиационные риски, обусловленные наличием радионуклида ^{137}Cs для лиц, проживающих в населенных пунктах, прилегающих к озеру Куяш. Радиационные риски рассматриваются в контексте полученной эффективной дозы за счет внешнего и внутреннего облучений. Озеро расположено на восточной периферии ВУРСа и расположено внутри зоны наблюдения ПО «Маяк», на его побережье расположены 3 населенных пункта. Данная территория попала под воздействие как Кыштымской аварии, так и Карачаевского инцидента. Согласно ретроспективным картам загрязнения почв ВУРСа и Карачаевского следа ^{90}Sr и ^{137}Cs на 1967 г. [3], рассматриваемая территория подверглась загрязнению 0,5–15 Ки/км^2 по ^{137}Cs и до 3 Ки/км^2 по ^{90}Sr.

В работе рассматриваются два сценария облучения:

– внешнее облучение ^{137}Cs от поверхности почвы на обследованном участке и внутреннее облучение за счет поступления ^{137}Cs с пищей, условно произведенной на обследованном участке;

– внешнее и внутреннее облучение за счет ветрового подъема ^{137}Cs с поверхности почвы.

1. Уткин В.И., Чеботина М.Я., Евстигнеев А.В., Екидин А.А., Рыбаков Е.Н., Трапезников А.В., Щапов В.А., Юрков А.К. Радиоактивные беды Урала. Екатеринбург, 2000.
2. Носовец В.С., Мищенко Л.А., Миргородских К.С., Сахно К.С., Екидин А.А., Назаров Е.И. Опыт независимого радиационного контроля на общественно доступных участках зоны наблюдения ФГУП "ПО "Маяк" // Вопросы радиационной безопасности. 2022. № 1 (105). С. 3-10.
3. Атлас ВУРСа 2013 [Электронный ресурс] // ФГБУ «Институт глобального климата и экологии имени академика Ю.А. Израэля». URL: http://downloads.igce.ru/publications/Atlas/CD_VURS/ (дата обращения 18.01.2023)

СЕКЦИЯ 2

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

ПЛОТНОСТЬ И ЭЛЕКТРИЧЕСКОЕ СОПРОТИВЛЕНИЕ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНОГО СПЛАВА AlCoNiCuZr

Русанов Б.А.[1], Агапова Ю.К.[1], Стерхов Е.В.[2], Русанова А.И.[2], Сидоров В.Е.[1]
[1)] Уральский государственный педагогический университет, Екатеринбург, Россия
[2)] Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия
E-mail: gdacherry@bk.ru

DENSITY AND ELECTRICAL RESISTIVITY OF AlCoNiCuZr HIGH-ENTROPY ALLOY

Rusanov B.A.[1], Agapova J.K.[1], Sterkhov E.V.[2], Rusanova A.I.[2], Sidorov V.E.[1]
[1)] Ural State Pedagogical University, Ekaterinburg, Russia
[2)] Institute of Metallurgy UB RAS, Ekaterinburg, Russia

Density and electrical resistivity of AlCoNiCuZr high-entropy alloy of equiatomic composition are experimentally investigated. It is shown that the alloy has a wide region of crystalline state with linear polytherms of properties. Solidus and liquidus temperatures were experimentally found.

Развитие современной промышленности, особенно авиа- и судостроения предъявляет к конструкционным и функциональным материалам высокие требования. На смену традиционным сплавам приходят новые композиции, в частности, высокоэнтропийные сплавы (ВЭС), которые демонстрируют хорошие показатели прочности, микротвердости и других механических свойств [1]. Особое место среди ВЭС занимают составы, содержащие алюминий, так как уменьшение удельного веса изделий имеет важное практическое значение. Однако физико-химические свойства ВЭС практически не изучены и в большинстве из них определяются из расчетов и моделирования. В настоящей работе проведены экспериментальные исследования плотности и электрического сопротивления высокоэнтропийного сплава AlCoNiCuZr эквиатомного состава в широком температурном интервале, включая жидкое состояние.

Сплав состава $Al_{20}Co_{20}Ni_{20}Cu_{20}Zr_{20}$ получен методом электродуговой плавки. Переплав повторялся 4 раза для получения гомогенного образца. Плотность сплава изучена с использованием метода проникающего гамма-излучения в температурном интервале 20 – 1600 ºС со скоростью нагрева/охлаждения 2 ºС/мин в защитной атмосфере высокочистого гелия. Электрическое сопротивление измерено с использованием бесконтактного метода во вращающемся магнитном поле в температурном интервале 20 – 1600 ºС с шагом по температуре 25 ºС и изотермическими выдержками 10 мин в атмосфере гелия. Температуры солидус и ликвидус определены по результатам дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК) на установке Netzsch STA 449F1, проведенной со скоростью 10 ºС/мин.

Установлено, что сплав имеет широкую область кристаллического состояния до температуры солидус ($t_S \approx 1000$ °C) в которой отсутствуют какие-либо тепловые эффекты. Это может свидетельствовать о наличии стабильной фазы (фаз) по типу твердого раствора, образовавшейся при закалке сплава, что характерно для ВЭСов. Сплав имеет широкую двухфазную область (около 100°C) в которой происходит ступенчатое изменение свойств, что может свидетельствовать о распаде стабильной фазы (фаз) на двойные и тройные интерметаллиды и формирование более «рыхлой» структуры.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-22-00029.

1. Y.F. Ye, Q. Wang, J. Lu, C.T. Liu, Y. Yang. High-entropy alloy: challenges and prospects // Materials Today, V. 19 (6), 2016, P.349-362.

СДВИГ ОПТИЧЕСКОЙ ЩЕЛИ В МОНОКРИСТАЛЛАХ ГИБРИДНОГО ПЕРОВСКИТА $CH_3NH_3PbBr_3$

Ахатов М.В.[1], Сарычев М.Н.[1], Жевстовских И.В.[3], Семенова О.И.[2]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН, Новосибирск, Россия
[3)] Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: maximen732@gmail.com

SHIFT OF OPTICAL BANDGAP IN $CH_3NH_3PbBr_3$ HYBRID PEROVSKITE SINGLE CRYSTALS

Akhatov M.V.[1], Sarychev M.N.[1], Zhevstovskikh I.V.[3], Semenova O.I.[2]
[1)] Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia
[2)] A.V. Rzhanov Institute of Semiconductor Physics, SB RAS, Novosibirsk, Russia
[3)] M.N. Miheev Institute of Metal Physics, UB RAS, Ekaterinburg, Russia

We report the results of photoluminescence (PL) and cathodoluminescence (CL) in organic-inorganic hybrid perovskite $CH_3NH_3PbBr_3$. The PL spectra were registered with the 455 nm laser over temperatures from 10 to 320 K. The CL spectra were taken at accelerating voltages of 1.1 kV and 1.3 kV.

В последнее десятилетие появился новый класс уникальных фотоактивных материалов – гибридных (органо-металлических) перовскитов с общей формулой $CH_3NH_3PbX_3$ (где X=I, Br, Cl), интенсивное исследование которых обусловлено замечательными оптоэлектронными свойствами и экономичными способами изготовления. Известно, что оптоэлектронные свойства материалов, наблюдаемые в макромасштабе, регулируются процессами, проходящими на гораздо меньших, нано или атомистическом, масштабах [1]. В этом смысле изучение свойств гидридных перовскитов для оптоэлектронных приложений с помощью катодолюминесценции (КЛ) является мощным и хорошо зарекомендовавшим себя методом анализа рекомбинации носителей заряда с нанометровым пространственным разрешением. В полупроводниках КЛ возникает в результате излучательной рекомбинации избыточных электронов и дырок, генерируемых электронным лучом. Процессы люминесценции, происходящие при КЛ измерениях, в принципе, такие же, как и при стандартных измерениях фотолюминесценции (ФЛ): избыточные электроны и дырки подвержены дрейфу, диффузии и рекомбинации через безызлучательные и излучательные механизмы, независимо от того, возбуждаются они электронным пучком (КЛ) или оптически (ФЛ). Однако различия в генерации избыточных носителей между этими двумя методами могут привести к получению различной информации. Например, в КЛ объем возбужденного вещества может быть значительно меньше, чем в ФЛ. Электронный луч может генерировать носители

значительно глубже светового луча. Это можно использовать чтобы отделить эффекты поверхностной рекомбинации от объемной. Поэтому представлялось интересным изучить оптические свойства методами КЛ и ФЛ на одних и тех же образцах монокристаллов $CH_3NH_3PbBr_3$.

Рисунок – Спектры КЛ (кривая 1) и ФЛ (кривая 2) при температуре 160 К.

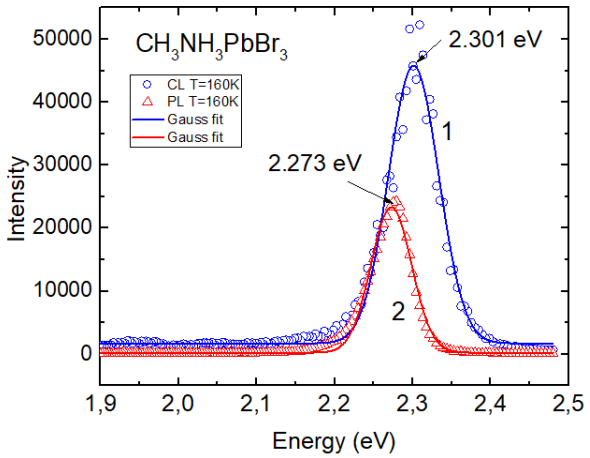


Рис. 1. Спектры КЛ (кривая 1) и ФЛ (кривая 2) при температуре 160 К.

В докладе представлены результаты исследования катодолюминесценции (КЛ) и фотолюминесценции (ФЛ) в монокристаллах $CH_3NH_3PbBr_3$ (размеры монокристаллов были около 3x4x2 мм) в широком интервале температур от 10 К до 320 К. Спектры ФЛ были получены при энергии возбуждающего лазера 2.72 эВ (λ=455 нм). Спектры КЛ были сняты при ускоряющих напряжениях 1,1 кВ и 1,3 кВ и токе 2μA. Малые значения ускоряющего напряжения были выбраны для того, чтобы подавить эффекты реабсорбции и обеспечить небольшую (менее 50 нм от поверхности) глубину проникновения электронного пучка [1,2]. Из Рисунка видно, что при Т=160 К в спектрах ФЛ и КЛ наблюдается одиночный пик с энергией около 2,3 эВ, близкой к величине запрещенной зоны в $CH_3NH_3PbBr_3$. Мы обнаружили, что разность энергий в положении пиков КЛ и ФЛ составляет около 28 мэВ. Подобные значения были получены нами и при других температурах, причем в разных кристаллических фазах. Причиной такого расхождения, по-видимому, является проявление различия в объемных и поверхностных состояниях перовскита, так как глубина проникновения света при ФЛ более чем в 10 раз превышает глубину при КЛ.

1. Harvey Guthrey and John Moseley. A Review and Perspective on Cathodoluminescence Analysis of Halide Perovskites. Adv. Energy Mater. 2020, 10, 1903840.
2. S.P. Sarmah, V.M. Burlakov, E. Yengel et al. Double Charged Surface Layers in Lead Halide Perovskite Crystals. Nano Lett. 2017, 17, 2021−2027.

СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ И МЕТАСТАБИЛЬНЫЕ СОСТОЯНИЯ В СУЛЬФИДЕ $Co_{0.56}Cr_{0.4}S$

Акрамов Д.Ф.[1], Селезнева Н.В.[1], Шишкин Д.А.[1, 2], Казанцев В.А.[2], Баранов Н.В.[1, 2]

[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, ИЕНиМ, г. Екатеринбург, Россия

[2)] Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: dmaster96@mail.ru

STRUCTURAL PHASE TRANSFORMATIONS AND METASTABLE STATES IN SULPHIDE $Co_{0.56}Cr_{0.4}S$

Akramov D.F.[1], Selezneva N.V.[1], Shishkin D.A.[1, 2], Kazantsev V.A.[2], Baranov N.V.[1, 2]

[1)] Ural Federal University, Institute of Natural Sciences and Mathematics, Ekaterinburg, Russia

[2)] Institute of Metal Physics of Ural Branch of Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russia

The cation-deficient compound $Co_{0.56}Cr_{0.4}S$ is found to exhibit anomalous changes in the magnetization and thermal expansion associated with a structural phase transition. The initial structural and magnetic state can be achieved after additional annealing and quenching from 1000°C.

Среди халькогенидов переходных 3d-металлов (M) существует большая группа катион-дефицитных соединений $M_{1\pm\delta}Ch$ (Ch = S, Se, Te), обладающих слоистой структурой. Магнитные свойства таких соединений зависят как от сорта атомов M и Ch, так и от концентрации и упорядочения вакансий в катионной или анионной подрешетках. Например, в системах $CoCr_2Ch_4$ наблюдается как кубическая структура типа $MgAl_2O_4$, так и моноклинная структура типа NiAs (Cr_3S_4) [1]. Данный класс соединений примечателен переходом из антиферромагнитного в ферримагнитное состояние при переходе от моноклинного $CoCr_2Se_4$ к кубическому $CoCr_2S_4$ [1]. В $CoCr_2Se_4$ так же обнаружен фазовый переход, обусловленный изменением спинового состояния атомов кобальта в интервале температур ~ 200 К – 275 К [2]. В работе [3] приведена фазовая диаграмма системы Cr-S. Концентрационное разнообразие в упорядочении атомов хрома приводит к различным типам магнитного упорядочения. Увеличение содержания хрома в системе $Cr_2S_3 \rightarrow Cr_3S_4 \rightarrow Cr_5S_6 \rightarrow Cr_7S_8$ сопровождается усилением обменного взаимодействия между ионами хрома и увеличением температуры магнитного упорядочения вплоть до 450 К в фазе CrS. Состав $Cr_{0.96}S$ по данным рентгеновской дифракции однофазен и кристаллизуется в моноклинной сингонии. Однако, по данным магнитных измерений, в зависимости от термообработки, помимо основной фазы с T_N =

450 К в образцах присутствует фаза Cr_7S_8 с T_N = 125 К. В отличие от фазы CrS соединение CoS имеет гексагональную структуру типа NiAs и является парамагнетиком Паули [4].

В ходе работы нами было синтезировано катион-дефицитное соединение $Co_{0.56}Cr_{0.4}S$ и обнаружены его уникальные свойства.

Поликристаллический образец $Co_{0.56}Cr_{0.4}S$ был получен методом твердофазного ампульного синтеза с закалкой от T = 1000°C. Рентгенографическая аттестация осуществлялась на дифрактометре Bruker D8 ADVANCE. Измерения намагниченности осуществлялись на вибрационном магнитометре Lake Shore VSM 7407. Измерение теплового расширения проводилось на дилатометре DL-1500 RHP/DL-1500-H (UCVAC/SINKU).

Рентгеновская аттестация показала, что $Co_{0.56}Cr_{0.4}S$ является однофазным и кристаллизуются в гексагональной сингонии с пространственной группой P63/mmc. Обнаружено аномальное поведение температурной намагниченности в интервале от 660 К до 900 К. В этом же температурном интервале происходит аномальное необратимое увеличение линейного размера образца ~ 6 %, а также резкое изменение магнитных характеристик. Установлено, что при T ~ 660 К происходит как структурный фазовый переход от гексагональной симметрии к кубической, так и выделение кобальта. Исходное структурное и магнитное состояние соединения возвращается после дополнительного отжига и последующей закалки от 1000°C. Полученные данные говорят о метастабильности структурного и магнитного состояния соединения $Co_{0.56}Cr_{0.4}S$.

Работа подготовлена при финансовой поддержке ППК 3.1.1.1.г-20.

1. Gibart P. New Ferrimagnetic Spinel Compositions in the System $MCr_2S_{4-x}Se_x$ Where M = Fe, Co, Mn // Journal of Physics and Chemistry of Solids. V. 34. 1973. P. 1363-1368.
2. Svitlyk V., Chernyshov D., Mozharivskyj Y. et al. Temperature- and Pressure-Induced Spin Crossover in Co1+xCr2−xSe4 (x = 0.24): A Diffraction Study // Inorganic Chemistry. V. 55. 2016. P. 338-344.
3. Popma T.J.A., Van Bruggen C. F. Structure and magnetic phase transitions of chromium sulfides Cr1-xS with $0 \leq x \leq 0.12$ // Journal of Inorganic and Nuclear Chemistry. V. 31. 1969. P. 73 – 80.
4. Umeyama N., Tokumoto M., Yagi S., Tomura M., Tokiwa K., Fujii T., Toda R., Miyakawa N., Ikeda S-I. Synthesis and Magnetic Properties of NiSe, NiTe, CoSe, and CoTe // Japanese Journal of Applied Physics. V. 51. 2012. P. 053001-6.

THE EFFECT OF Tb AND Mn ON THE INTERCHANGE INTERACTION FOR $La_{0.2}Tb_{0.8}Mn_2Si_2$ AND $La_{0.4}Tb_{0.6}Mn_2Si_2$

Alsafi Haneen M[1], Gerasimov E. G.[1, 2], Borisova P. A.[3], Glazkov V. P.[3], Dujeva E. V.[3], Pirogov A.N.[1, 2]

[1)] Institute of Natural Sciences and Mathematics, Ural Federal University, 620002 Ekaterinburg, Russia

[2)] Institute of Metal Physics of UB RAS, S. Kovalevskaya str, 18 Ekaterinburg, Russia

[3)] Institute Research Center "Kurchatov Institute", Moscow, Russia

E-mail: haneenalsafi.1991@gmail.com

Based on magnetic phase diagram of the $La_{1-x}Tb_xMn_2Si_2$ system obtained from magnetization measurements, we have chosen the $La_{0.2}Tb_{0.8}Mn_2Si_2$ and $La_{0.4}Tb_{0.6}Mn_2Si_2$ samples for neutron diffraction.

Intermetallic compounds with general formula RM_2X_2, where R is the rare earth metal; M is the transition 3d-, 4d-, or 5d-metal; X is Si or Ge, crystallize in the body-centered tetragonal $ThCr_2Si_2$-type structure. The structure consists of the single-atomic layers of different elements, stacked along the crystallographic c-axis in the sequence-M-X-R-X-M-. The natural layered structure is considered to be responsible for very exciting variety of physical properties ranging from superconductivity to heavy-fermion behavior.

The compounds RM_2X_2 for M=Mn attracts the greatest attention since they demonstrate a wide variety of magnetic structures and magnetic phase transitions. One of the reasons of the transitions is due to a strong dependence of the type of interlayer Mn-Mn ordering on the lattice parameters and on the in-plane Mn–Mn distance $d_{Mn–Mn}$. For the RMn_2X_2 compounds with $d_{Mn\text{-}Mn} < d_c \approx 0.285–0.287$ nm, the resultant Mn magnetic moments of adjacent Mn layers are ordered antiferromagnetically along the c-axis, while for $d_{Mn\text{-}Mn} > d_c$ the ferromagnetic ordering is typically realized [1].

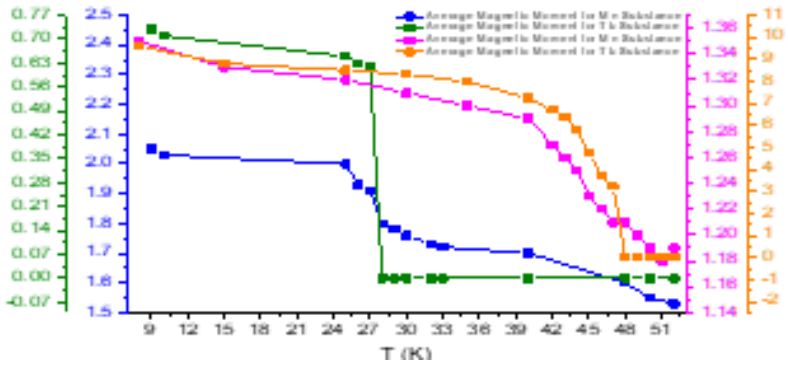


Fig. 1. Temperature dependences of Tb-ion and Mn-atom magnetization for $La_{0.2}Tb_{0.8}Mn_2Si_2$ and $La_{0.4}Tb_{0.6}Mn_2Si_2$ samples

Based on magnetic phase diagram of the $La_{1-x}Tb_xMn_2Si_2$ system obtained from magnetization measurements, we have chosen the $La_{0.2}Tb_{0.8}Mn_2Si_2$ and $La_{0.4}Tb_{0.6}Mn_2Si_2$ samples for neutron diffraction.

According to the PND analysis, the Tb-ion has bigger atomic radius than the La-ion. Therefore, the lattice parameters of $La_{1-x}Tb_xMn_2Si_2$ compounds gradually increase with increasing the temperatures.

Moreover, we found the temperature dependences of Tb-ion and Mn-atom magnetization. The Mn-atom magnetization (μ_{Mn}) change monotonously with temperature. Also, there is a clear effect on Tb-ion magnetization (μ_{Tb}), whereas the temperature increases the value of μ_{Tb} decreases from 9.61 μ_B to ~ 0 μ_B for $La_{0.2}Tb_{0.8}Mn_2Si_2$ and from 0.73 μ_B to ~ 0 μ_B for $La_{0.4}Tb_{0.6}Mn_2Si_2$ (see fig. 1).

This work was supported by MES of RF (contract No. FEUZ-2020-0050).

1. Gerasimov, E. G., Mushnikov, N. V., Terentev, P. B., Yazovskikh, K. A., Titov, I. S., Gaviko, V. S., & Umetsu, R. Y. (2017). Competing exchange interactions and magnetic anisotropy of $La_{1-x}Tb_xMn_2Si_2$. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 422, 237-242.

ОЦЕНКА ТОЧНОСТИ И СКОРОСТИ ВЫЧИСЛЕНИЙ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ НА ОСНОВЕ ПОТЕНЦИАЛА МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ УГЛЕРОДНЫХ СТРУКТУР

Арсланов К.П.[1], Бунтов Е.А.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: arslanov.kirill@mail.ru

EVALUATION OF THE ACCURACY AND COMPUTATIONAL SPEED FOR THE METHOD OF MOLECULAR DYNAMICS WITH MACHINE LEARNING POTENTIAL FOR CARBON STRUCTURES

Arslanov K.P.[1], Buntov E.A.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Comparison of the machine learning potential and ReaxFF by studying the stability of different carbon structures during simulations in various temperature ranges and under Ar+ ion bombardment. Comparison of the potentials by simulating the ion-stimulated process of linear chain carbon film growth.

Традиционные подходы для молекулярно-динамического моделирования основаны на моделях квантовой механики и эмпирических межатомных потенциалах. Методы, основанные на принципах квантовой механики хотя, и являются более точными, требуют значительных вычислительных ресурсов. Эмпирические потенциалы требуют значительно меньших вычислительных ресурсов, что позволяет моделировать динамические процессы на более длительных временных интервалах и в больших масштабах.

Эмпирический межатомный потенциал ReaxFF использует формализм порядка связи и описание поляризуемых зарядов для моделирования как реактивных, так и нереактивных взаимодействий между атомами. Это позволяет ReaxFF моделировать как ковалентные, так и электростатические взаимодействия для широкого спектра материалов [1], однако ReaxFF все же уступает по точности моделях квантовой-механики. В последние годы стали активно применяться методы машинного обучения, которые позволяют выполнять молекулярно-динамическое моделирование для крупномасштабных систем на длительных временных интервалах с квантовой точностью.

В данной работе проводится моделирование различных углеродных структур с помощью потенциала машинного обучения, обученного в программе DeepMD, и ReaxFF для сравнения их по точности и скорости вычислений. Будет исследоваться стабильность углеродных структур в различных температурных диапазонах и при бомбардировки ионами Ar^+.

В работе [2] с потенциалом ReaxFF было исследовано влияние бомбардировки ионами Ar^+ с разными энергиями и углами осаждения на рост пленки линейно-цепочечного углерода. Такое же исследование проводится с использованием потенциала машинного обучения, сравниваются результаты моделирования.

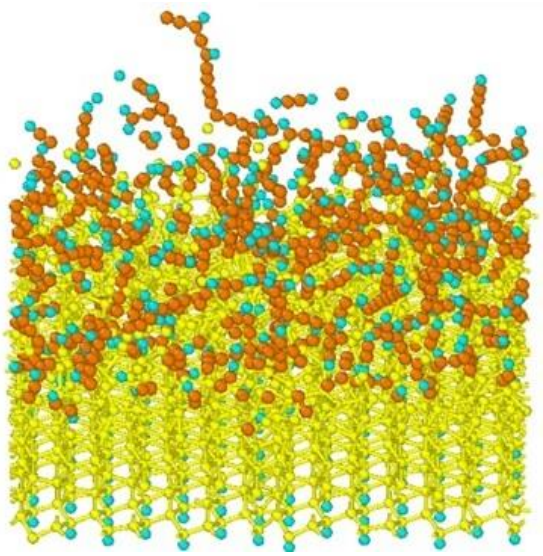


Рис. 1. Пример моделируемой пленки линейного-цепочечного углерода

1. Senftle T. P. et al. J. Nature Reviews Physics 2, 15011 (2016)
2. E. Buntov, K. Arslanov J. Plasma Process Polym. 19, 1, 2100135 (2022)

ВЛИЯНИЕ СРЕДЫ ТЕРМООБРАБОТКИ НА СТРУКТУРНЫЕ ПАРАМЕТРЫ ТОНКИХ ПЛЕНОК NiO

Артемьев М.С.[1], Изюров В.В.[1], Меренцова К.А.[1], Десятников И.А.[1], Дубинин С.С.[1], Носов А.П.[1]
[1)] Институт физики металлов
E-mail: cccp9697@mail.ru

INFLUENCE OF THE HEAT TREATMENT MEDIUM ON THE STRUCTURAL PARAMETERS OF NiO THIN FILMS

Artemyev M.S.[1], Izyurov V.V.[1], Merentsova K.A.[1], Desyatnikov I.A.[1], Dubinin S.S.[1], Nosov A.P.[1]
[1)] Institute of Metal Physics

Nickel oxide NiO is a light-plane antiferromagnet of the second type (S = 1) with a nickel temperature TN = 523 K. The crystal structure of NiO belongs to the NaCl type (Fm-3m spatial group) unit cell parameter a = 0.4182 nm [1]. Thin films of nickel oxide are of great interest for modern antiferrom

Оксид никеля NiO является легкоплоскостным антиферромагнетиком второго типа (S = 1) с температурой Нееля TN = 523 К. Кристаллическая структура NiO относится к типу NaCl (пространственная группа Fm-3m) параметр элементарной ячейки a = 0,4182 нм [1]. Тонкие пленки оксида никеля представляет большой интерес для современной антиферромагнитной спинтроники [2]. В работе рассматривалась зависимость изменения кристаллографических параметров тонких пленок NiO от среды послеростовой термообработки.

Пленки NiO толщиной 700 нм получали при помощи метода магнетронного распыления стехиометрический мишени на переменном токе в атмосфере 90%Ar + 10%O_2. Температура подложки из c-Al_2O_3 составляла 473 K на всем этапе процесса распыления. На следующем этапе пленки проходили процесс термообработки в разных средах с различным процентным содержанием кислорода: воздух, аргон и кислород при температуре 873 K в течение 3 часов. Рентгеноструктурные исследования проводились с использованием дифрактометра PANalytical Empyrean. Измеряли спектры рентгеновской дифракции в копланарной геометрии. Значения параметров решетки при каждой температуре были рассчитаны методом Нельсона-Рейли [3].

Полученная зависимость параметра решетки от давления кислорода в процессе термообработки тонких пленок NiO представлена на Рис.1. Пунктирная линия соответствует значению для монокристалла [1]. С ростом содержания кислорода в среде значения параметра решетки систематически уменьшаются. Такие изменения могут быть связаны с изменением стехиометрии образцов по

кислородной подрешетке, что требует дальнейшего независимого подтверждения.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «Функция», номер госрегистрации 122021000035–6).

1. M.I. Aivazov, A.G. Sarkisyan, I.A. Domashnev, S.V. Gurov, Inorganic Materials 7, 1389 (1971).
2. V. Baltz, A. Machnon, M. Tsoi, et. al. Rev. Mod. Phys. 90, 012002 (2018).
3. J.B. Nelson, D.P. Riley, Proc.Phys.Soc. 57, 160 (1945).

ПОЛУМЕТАЛЛИЧЕСКИЕ И ПОЛУПРОВОДНИКОВЫЕ СОСТОЯНИЯ В ЗОННОЙ СТРУКТУРЕ RSb И RNiSb, ГДЕ R = Tb, Dy, Ho

Байдак С.Т.[1, 2], Лукоянов А.В.[1, 2]
[1)] Физико-Технологический Институт, Кафедра Теоретической Физики и Прикладной Математики, Уральский Федеральный Университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург 620002, Россия
[2)] Институт Физики Металлов имени М.Н. Михеева Уральского Отделения Российской Академии Наук, Екатеринбург, 620108, Россия
E-mail: semenbaidak@mail.ru

SEMIMETALLIC AND SEMICONDUCTING STATES IN BAND STRUCTURE OF RSb AND RNiSb WITH R = Tb, Dy, Ho

Baidak S.T.[1, 2], Lukoyanov A.V.[1, 2]
[1)] Institute of Physics and Technology, Department of Theoretical Physics and Applied Mathematics, Ural Federal University named after the first President of Russia B. N. Yeltsin, Yekaterinburg 620002, Russia
[2)] M.N. Mikheev Institute of Metal Physics of Ural Branch of Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg 620108, Russia

Band structure of RNiSb and RSb compounds with R = Tb, Dy, Ho has been investigated using DFT+U method. (Tb, Dy, Ho)NiSb are found to be semiconductors with the indirect gap of about 0.2 eV, (Tb, Dy, Ho)Sb are found to be semimetals with the presence of hole and electron pockets.

RSb и RTSb – две близкие по кристаллической структуре и химическому составу группы соединений, содержащие в своем составе редкоземельный элемент R, переходный металл T, а также элемент Sb. Во многих соединениях данных групп обнаружены необычные магнитные и транспортные свойства, например, огромное магнитосопротивление [1] и термоэлектрические свойства [2], позволяющие применять такие соединения для преобразования тепла в электричество с большой эффективностью. В двойных RSb соединениях обнаружены топологические особенности зонной структуры, в частности фермионы Вейля в полуметалле GdSb [3]. В данной работе были проведены теоретические расчеты электронной структуры тройных RNiSb и двойных RSb соединений, где R = Tb, Dy, Ho, в рамках DFT+U метода, позволяющего учесть сильные электронные корреляции в 4f оболочках ионов редкоземельных элементов. Соединения обладают схожей кристаллической структурой половинных сплавов Гейслера. Расчеты показали наличие непрямой щели в зонной структуре RNiSb величиной 0.21, 0.21 и 0.26 эВ для (Tb, Dy, Ho)NiSb соответственно. В зонной структуре двойных RSb соединений зоны в районе высокосимметричных точек Γ и X оказываются смещены относительно тех же зон в тройных RNiSb, закрывая таким образом энергетическую щель и формируя

дырочный и электронный карманы, что характерно для полуметаллов. Наличие подобных карманов в направлениях L–Г–X и Г–X–W было подтверждено экспериментально для GdSb. Также в работе были исследованы магнитные свойства соединений. Теоретически рассчитанные величины магнитные моменты в рассматриваемых соединениях оказались близки к экспериментальным. Более подробно результаты исследования опубликованы в статье [4].

Данное исследование поддержано грантом Российского Научного Фонда No 22-42-02021.

1. Pierre J., Karla I., J. Magn. Magn. Mater., 217, 74–82 (2000).
2. Ciesielski K., Synoradzki K., Veremchuk I., Skokowski P., Szymański D., Grin Y., Kaczorowski D., Phys. Rev. Appl., 14, 054046 (2020).
3. Li Z., Xu D.-D., Ning S.-Y., Su H., Iitaka T., Tohyama T., Zhang J.-X., Int. J. Mod. Phys. B, 31, 1750217 (2017).
4. Baidak S.T., Lukoyanov A.V., Materials, 16, 242 (2023).

ЗАВИСИМОСТЬ КАРТИН КАУСТИКИ МАГНИТОУПРУГИХ ВОЛН ОТ МАГНИТНОГО ПОЛЯ В КРИСТАЛЛАХ $Fe_{82}Ga_{18}$

Бахарев С.М.[1, 2], Борич М.А.[1, 2], Савченко С.П.[1, 2]
[1)] Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2)] Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия
E-mail: bakharevsm@imp.uran.ru

DEPENDENCE OF THE CAUSTIC PATTERNS OF MAGNETOELASTIC WAVES ON THE MAGNETIC FIELD IN $Fe_{82}Ga_{18}$ CRYSTALS

Bakharev S.M.[1, 2], Borich M.A.[1, 2], Savchenko S.P.[1, 2]
[1)] M.N. Mikheev lnstitute of Metal Physics of Ural Branch of Russian Academy of Sciences
[2)] Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russia

The focusing and caustic effects of magnetoelastic waves (MEW) in Galfenol crystals in the vicinity of magnetoelastic resonance are considered. The directions of MEW caustics are controlled by the magnitude of the external magnetic field.

В рамках феноменологического подхода [1,2] рассчитан спектр магнитоупругих волн (МУВ) в кристаллах $Fe_{82}Ga_{18}$. Образец находится при температуре гораздо меньшей температуры Дебая, а характерный его размер гораздо больше длины волны. Показано, что спектр МУВ состоит из четырех мод, однако наибольший интерес с точки зрения фокусироки и каутики представляют моды III и IV. Анализ спектра и поверхностей постоянной частоты показал, что МУВ в определенных направлениях могут фокусироваться и образовывать каустики [3]. Проведено исследование влияния величины внешнего магнитного поля, направленного вдоль кристаллографической оси [001], на картины каустики МУВ. Показано, что в диапазоне полей 2.8..3.0 кЭ направления каустик МУВ существенно отличаются от направлений каустик фононных мод (см. рис. 1). Как видно из рис. 1, количество и вид каустических линий существенно зависят от магнитного поля. Например, для моды III (рис. 1(a)) в кристалле в магнитном поле до 2.94 кЭ наблюдаются четыре направления каустики МУВ. В полях 2.94..2.98 кЭ — 5 или 6 направлений каустик, а в полях больших 2.98 кЭ — только три направления каустики МУВ.

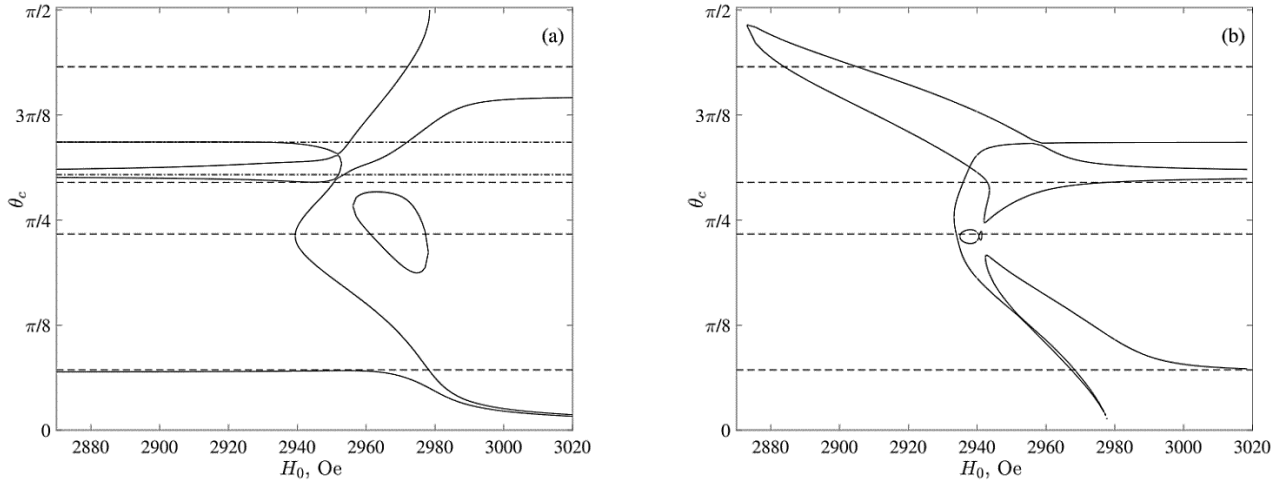


Рис. 1. Зависимость угла каустики от величины внешнего магнитного поля в кристалле $Fe_{82}Ga_{18}$. Сплошние линии – для МУВ ((a) – для моды III, (b) – для моды IV), штриховые и штрихпунктирные линии — направления каустик медленной и быстрой квазипоперечной фононной моды соответственно.

Результаты исследования получены в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема «Функция» № 122021000035–6) и при поддержке гранта РНФ (проект № 22-19-00355).

1. Borich M.A. ,Bakharev S.M. , Savchenko S.P. Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 564. 170074 (2022)
2. Такер Дж., Рэмптон В. Гиперзвук в физике твердого тела. — М.: Мир, 455 с. (1975)
3. Wolfle J.P. Imaging Phonons Acoustic Wave Propagation in Solids — N.Y. Cambridge University Press, 411 p. (1998)

СВОЙСТВА МОНОКРИСТАЛЛОВ И ОПТИЧЕСКОЙ КЕРАМИКИ НА ОСНОВЕ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ СИСТЕМЫ $AgCl_{0,25}Br_{0,75}$ - AgI

Барыкина С.Е.[1], Щукина А.А.[1], Жукова Л.В.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: barykina.sof@gmail.com

PROPERTIES OF SINGLE CRYSTALS AND OPTICAL CERAMICS BASED ON THE $AgCl_{0,25}Br_{0,75}$ - AgI SYSTEM SOLID SOLUTIONS

Barykina S.E.[1], Schukina A.A.[1], Zhukova L.V.[1]
[1)] Ural federal university named after first President of Russia B. N. Yeltsin

In this paper, the optical properties of new infrared materials based on the $AgCl_{0.25}Br_{0.75}$ – AgI system were studied. Single crystals and optical ceramics are transparent in the range from 0.488 to 54 μm, are photoresistant, and their refractive indices varies from 2.56 to 2.17.

Для развития волоконной и лазерной оптики идет разработка пластичных, негигроскопичных, нетоксичных, фото- и радиационно стойких материалов, прозрачных от видимой до дальней ИК области спектра (от 0,4 до 60,0 мкм) на основе галогенидов серебра. Волокна на их основе обладают низкими оптическими потерями, а технология их изготовления является гибкой и экономичной. Данные материалы применяются в различных областях промышленности, например, в оптоэлектронике, фотонике, ИК-спектроскопии, лазерной медицине, космических технологиях, а также в волоконно-оптических системах.

Одной из известных галогенидсеребряных систем является AgCl – AgBr, монокристаллы на основе которой прозрачны в диапазоне от 0,4 до 30,0 мкм [1]. Однако данные монокристаллы являются фоточувствительными, что ограничивает их применение. С целью повышения фото- и радиационной стойкости были проведены исследования системы, которая помимо хлорида и бромида серебра дополнительно содержит AgI. Ранее была построена фазовая диаграмма системы $AgCl_{0,25}Br_{0,75}$ – AgI, определены области гомогенности и гетерогенности, а также была получена серия монокристаллов и оптической керамики.

Для исследования свойств полученных материалов и оценки их пригодности для производства оптических волокон на их основе методом горячего прессования были изготовлены плоскопараллельные пластины толщиной 280-420 мкм и размером 10-20 мм. Основными оптическими свойствами, исследованными в данной работе, являются спектральное пропускание, показатель преломления и фотостойкость. Для оценки диапазона спектрального пропускания было использовано три спектрометра с различным диапазоном

работы: спектрофотометр UV-1800 (Shimadzu), работающий в диапазоне от 190 до 1100 нм, ИК Фурье спектрометр IR-Prestige-21 (Shimadzu), охватывающий область от 1,56 до 41,7 мкм, спектрометр Vertex 80 (Bruker) с диапазоном 14,7 – 60,6 мкм. Для расчета показателя преломления использовалась спектроскопическая методика. Для измерения фотостойкости монокристаллов и оптической керамики использовали спектрометры и специально изготовленную установку для облучения образцов. Перед облучением образца снимался спектр его пропускания, после чего образец подвергался последовательному облучению в установке с набором времени облучения 530 мин. По результатам исследований было получено, что атериалы обладают широким диапазоном пропускания от 488 нм до 54 мкм без окон поглощения. Показатель преломления материалов в зависимости от состава изменяется от 2,56 до 2,17. В результате УФ облучения наблюдалось снижение пропускания в коротких длинах волн (до 1,56-12,5 мкм). В некоторых образцах при малых дозах облучения наблюдалось просветление в коротких длинах волн. Однако в области более длинных волн: от 1,56 до 12,5 мкм, в зависимости от состава, высокая прозрачность материалов сохранялась. Таким образом, разработанные материалы обладают высокими функциональными свойствами, что открывает высокие перспективы их дальнейшего применения.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, Государственный контракт № FEUZ-2023-021 (Н687.42Б.325/23).

1. Korsakov A., Zhukova L., Korsakova E., Zharikov E., “Structure modeling and growing $AgCl_xBr_{1-x}$, $Ag_{1-x}Tl_xBr_{1-x}I_x$, and Ag 1-xTlxClyIzBr1-y-z crystals for infrared fiber optics,” J. Cryst. Gr., 386, 94-99, (2014).

МАГНИТО-ОПТИЧЕСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ТОПОЛОГИЧЕСКОГО ИЗОЛЯТОРА $BI_{1.1}SB_{0.9}Te_2S$

Беляев Д.В.[1], Якушев М.В.[1, 2, 5, 6], Орлита М.[7], Гребенников В.И.[1], Кох К.А.[3], Терещенко О.Е.[4], Кузнецова Т.В.[1, 2]

[1)] Институт физики металлов имени М.Н. Михеева, Екатеринбург, Россия

[2)] Уральский Федеральный Университет, Екатеринбург, Россия

[3)] Институт геологии и минералогии имени В.С. Соболева СО РАН, Новосибирск, Россия

[4)] Институт физики полупроводников имени А.В. Ржанова СО РАН, Новосибирск, Россия

[5)] Факультет физики, SUPA, Стратклайдский университет, Глазго, Соединенное Королевство

[6)] Институт химии твёрдого тела УрО РАН, Екатеринбург, Россия

[7)] Национальная лаборатория сильных магнитных полей (LNCMI), Гренобль, Франция

E-mail: danil.belyaev08@gmail.com

MAGNETO-OPTICAL STUDY OF THE TOPOLOGICAL INSULATOR $Bi_{1.1}Sb_{0.9}Te_2S$

Belyaev D.V.[1], Yakushev M.V.[1, 2, 5, 6], Orlita M.[7], Grebennikov V.I.[1], Kokh K.A.[3], Tereshchenko O.E.[4], Kuznetsova T.V.[1, 2]

[1)] Institute of Metal Physics Urals Branch of the Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russia

[2)] Ural Federal University named after the First President of Russia B. N. Yeltsin, Ekaterinburg, Russia

[3)] Institute of Geology and Mineralogy, SB of the Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, Russia

[4)] Institute of Semiconductor Physics, SB of the Russian Academy of Science, Novosibirsk, Russia

[5)] Department of Physics, SUPA, Strathclyde University, Glasgow, United Kingdom

[6)] Institute of Solid State Chemistry, Urals Branch of the Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russia

[7)] Laboratoire National des Champs Magnétiques Intenses (LNCMI), Grenoble, France

We study the electronic properties of the $Bi_{1.1}Sb_{0.9}Te_2S$ topological insulator by the magneto-optical spectroscopy. Reflection and transmission spectra were obtained in magnetic fields from 0 to 11 T. A strong influence of the magnetic field on the electronic structure and optical spectra is shown.

Топологические изоляторы (ТИ) представляют собой новое квантовое состояние материи. ТИ являются изолирующими в объеме в то время, как сильная спин орбитальная связь на поверхности создает топологически защищенные поверхностные состояния с дисперсией в виде дираковского конуса [1,2]. ТИ обладают уникальными электронными свойствами и рассматриваются,

как многообещающие материалы для использования в спинтронике и квантовой электронике [3, 4]. Данный класс материалов исследуется различными методами в число, которых входят фотоэлектронная спектроскопия с угловым разрешением (ARPES), транспортные измерения, рамановская спектроскопия и магнито-оптические измерения. Магнито-оптические измерения, в частности, являются одной из наиболее эффективных техник для изучения электронных свойств материалов. Так, в данной работе проведено магнито-оптическое исследование свойств ТИ $Bi_{1.1}Sb_{0.9}Te_2S$ в ИК-диапазоне.

Монокристалл $Bi_{1.1}Sb_{0.9}Te_2S$ был выращен вертикальным методом Бриджмена из высокочистых Bi, Sb, Te и S, что детально описано в [5]. Спектры отражения и пропускания были измерены в диапазоне частот от 0 до 5000 $см^{-1}$ при 4.2 К на спектрометре Bruker IFS 66v/S FTIR. Для измерения спектров отражения использовались образец размером 3×3×0.5 мм, спектры пропускания измерялись на пленках толщиной 25 мкм, полученных из того же образца. Магнито-оптические измерения проводились для магнитных полей до 11 Тл в геометрии Фарадея (B параллельно оси с образца).

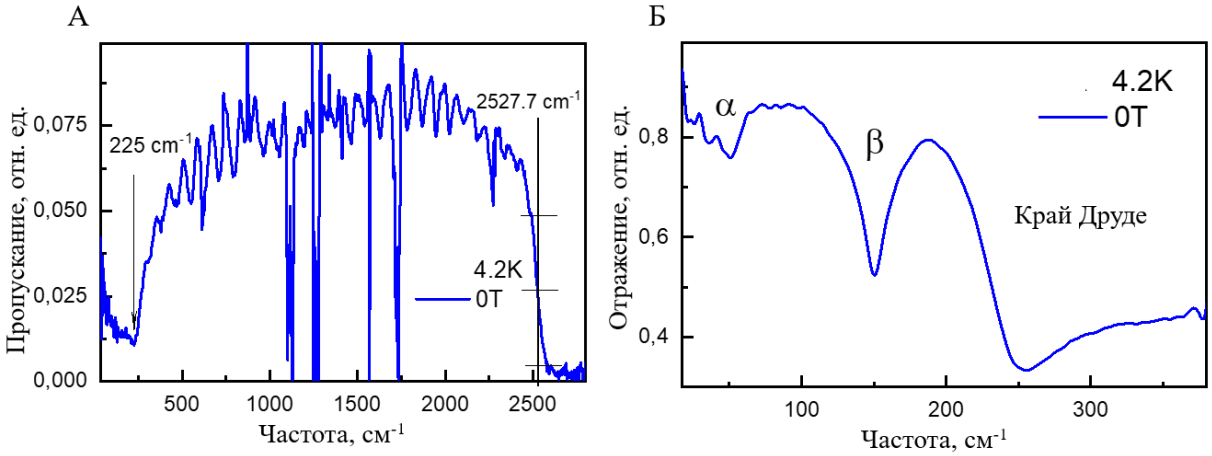


Рис. 1. Спектры пропускания и отражения в дальнем ИК-диапазоне

На рисунке 1 представлены спектры пропускания и отражения в дальнем ИК-диапазоне. На спектре пропускания виден острый край поглощения около 2530 $см^{-1}$ и низкочастотный край плазмы с явным минимум при 255 $см^{-1}$. Край поглощения при 2530 $см^{-1}$ относится к рекомбинации электронов из зоны проводимости и дырок из валентной зоны в то время, как край плазмы при 255 $см^{-1}$ связан со свободными носителями. При приложении магнитного поля осцилляции Фабри-Перо становятся значительно меньше, что может быть связано с фарадеевским вращением плоскости поляризации в магнитном поле. На спектре отражения не наблюдается никаких экситонных особенностей на краю зоны поглощения, предполагая очень короткое время жизни экситонов из-за высокой концентрации дефектов. Однако на спектре видны три минимума: α, β и край Друде с минимумами на 51, 151 и 256 $см^{-1}$ соответственно. При приложении магнитного эти минимумы в спектре отражения смешается в

сторону более высоких частот. Также в данной работе был определен g-фактор для данного соединения. Таким образом, было показано сильное влияние магнитного поля на электронную структуру и оптические спектры топологического изолятора $Bi_{1.1}Sb_{0.9}Te_2S$.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «Спин», № 122021000036-3) при частичной поддержке РФФИ (проект № 19-29-12061).

1. M.Z. Hasan, , et al., Rev. Mod. Phys. 82, 3045 (2010).
2. X. L. Qi, S. C. Zhang, Reviews of Modern Physics. 83, 1057 (2011).
3. L. Fu and C. L. Kane, Phys. Rev. Lett. 100, 096407 (2008).
4. J. E. Moore, Nature (London) 464, 194 (2010).
5. Khatchenko Y. E. et al., Journal of Alloys and Compounds. 890, 161824 (2022).

ИЗМЕНЕНИЕ ГИДРОФИЛЬНОСТИ И ГИДРОФОБНОСТИ МАТЕРИАЛОВ ПРИ НАНЕСЕНИИ ГРАФЕНА

Бетке И. А.[1, 2]
[1)] Новосибирский национальный исследовательский государственный университет
[2)] Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе Сибирского отделения Российской академии наук
E-mail: i.betke@g.nsu.ru

CHANGES IN THE HYDROPHILICITY AND HYDROPHOBICITY OF MATERIALS DURING APPLICATION GRAPHENE

Betke I. A.[1, 2]
[1)] Novosibirsk State University
[2)] Kutateladze Institute of Thermophysics of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences

In this work, graphene synthesized by the APCVD method was transferred to atomically smooth and textured silicon and copper surfaces. It is shown that graphene has a significant effect on wettability and is able to preserve the properties of materials.

В научной среде нет единого мнения о том, как графен (моноатомный слой sp^2-гибридизованных атомов углерода) изменяет смачиваемость гидрофильных и гидрофобных материалов. Так как использование графена перспективно во многих областях, разрешение данного вопроса может привести к важным открытиям в микроканальной физике или поможет решить одну из важных задач современной гидродинамики – создании поверхности с регулируемым значением контактного угла.

Цель работы – устранить противоречия, расширив представления о свойствах графена и его влиянии на различные поверхности и исследовать возможность консервации свойств материала, деградирующих на атмосфере, графеновым покрытием.

В работе исследовано влияние графенового покрытия на смачиваемость гладких и текстурированных поверхностей с супергидрофильными и супергидрофобными свойствами [1]. Образцы графена были синтезированы методом атмосферного ХОГФ на медной подложке [2]. В качестве атомарно гладких образцов использовались пластины монокристаллического кремния, покрытые оксидной пленкой различной толщины. Текстурированные супергидрофильные и супергидрофобные поверхности на основе кремния и меди были получены методом лазерной абляции.

Показано, что на всех образцах графен уменьшал как гидрофильные, так и гидрофобные свойства, устремляя значение контактного угла к собственному углу смачивания графита. При этом в сравнении с атомарно гладкими поверхностями, на текстурированных образцах влияние графена усиливалось.

Особое внимание уделялось деградирующим образцам, которые вследствие осаждения из воздуха функциональных C-C и C-H групп за время эксперимента изменяли свойства от супергидрофильных до супергидрофобных. Покрытие таких образцов графеном приводило к стабилизации нейтрального значения контактного угла около 90°.

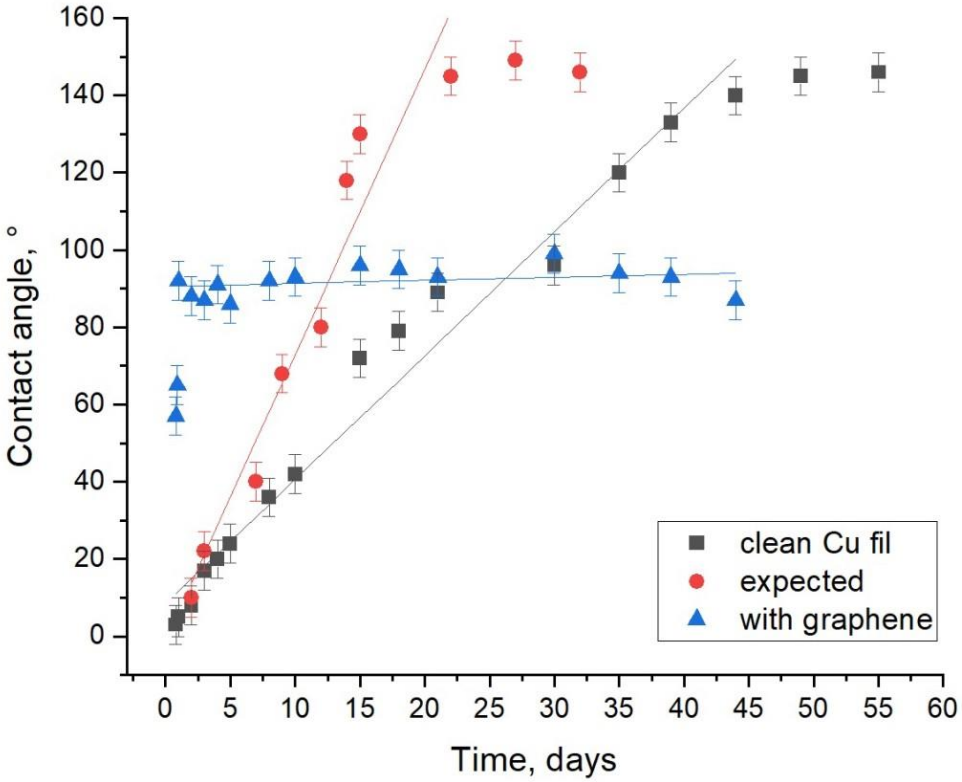


Рис. 1. Контактные углы эволюционирующих образцов

Показано, что поверхности медных подложек с графеновым покрытием, подвергшиеся длительной экспозиции на воздухе, после удаления графена всё равно возвращались в гидрофильное состояние.

В результате работы подтверждена гипотеза о существенной роли характера прилегания графена к поверхности на модификацию её свойств, исследованы явления стабилизации и консервации свойств подложки при нанесении графеновой плёнки.

1. Sergey V. Starinskiy et al., Applied Surface Science, 512, 145753, (2020)
2. S.Y Misyura, V.A Andryushchenko, V.S Morozov, Experimental Heat Transfer, 512, 6, (2022)

КОНЦЕНТРАЦИОННЫЕ ЗАВИСИМОСТИ ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЯ ТРОЙНЫХ И БИНАРНЫХ СПЛАВОВ ПРИ МАКСИМАЛЬНОМ ДАЛЬНЕМ ПОРЯДКЕ

Бородин К.И.[2], Волков В.А.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, 620002, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Институт физики металлов им. Н. А. Михеева УрО РАН, 620108, Россия, Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18
E-mail: bkimm@mail.ru

CONCENTRATION DEPENDENCES OF ELECTRICAL RESISTIVITY OF TERNARY AND BINARY ALLOYS AT THE MAXIMUM LONG-RANGE ORDER

Borodin K.I.[2], Volkov V.A.[1]
[1)] Ural Federal University, 19 Mira Str., Yekaterinburg, 620002, Russian Federation.
[2)] M. N. Mikheev Institute of Metal Physics, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, 620108, Ekaterinburg, 18 S. Kovalevskoi Str., Russian Federation.

The numerical calculation of the electrical resistance of ordered alloys is carried out in the coherent potential approximation. Concentration dependences at the maximum long-range order are studied. A comparison is made with the curves obtained in the weak scattering approximation.

Упорядочивающиеся сплавы играют важную роль в современной науке и технике. Возможность варьирования физических свойств за счет изменения состава и внутренней структуры делает их незаменимыми в качестве конструкционных материалов, широко используемых в различных отраслях промышленности. Многие приложения упорядочивающихся сплавов обусловлены их уникальными резистивными характеристиками.

В данной работе выполнен теоретический расчет концентрационных зависимостей электросопротивления тройных и бинарных упорядочивающихся сплавов в приближении когерентного потенциала (ПКП).

Для тройных сплавов, имеющих ОЦК-решетку, упорядочение можно описать двумя параметрами дальнего порядка. При этом можно рассматривать шесть различных типов концентрационных зависимостей характеристик сплава вдоль квазибинарных разрезов (C(a) = const, a = {A,B,C}) при максимальном дальнем порядке [1]. Здесь C(a) - концентрация компоненты (a) Стандартными для ПКП методами [2] были получены концентрационные зависимости энергии Ферми, плотности электронных состояний на уровне Ферми и остаточного электросопротивления вдоль ряда квазибинарных разрезов при максимальном дальнем порядке. Результаты представлены в графическом виде. Также в ПКП рассмотрен частный случай бинарного сплава, для которого получена

зависимость сопротивления от концентрации одной из компонент сплава при максимальном упорядочении. Эти результаты сравниваются с данными, полученными для электросопротивления в пределе слабого рассеяния (ПСР) [3]. Установлено, что именно немонотонное изменение числа носителей заряда (т.е. плотности электронных состояний на уровне Ферми) обусловливает аномальный характер концентрационных зависимостей электросопротивления.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «Сплавы») Г.р.№ АААА-А19-119070890020-3

1. Кривоглаз М.А., Смирнов А.А., Теория упорядочивающихся сплавов, ГИФМЛ (1958).
2. Волков В.А., Зеленин Л.П., Лобашева Н.А., Машаров С.И., Рыбалко А.Ф., Соболев А.Б., Тимофеев Н.И., Электросопротивление тройных упорядочивающихся сплавов замещения, Физика металлов и металловедение, 68, 3, (1989).
3. Смирнов А.А., Теория электросопротивления сплавов, Изд-во АН УССР (1960).

ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА ПОРОШКОВ АНИОНОДЕФИЦИТНОГО КОРУНДА

Бояринцев А.И.[1, 2], Абашев Р.М.[1, 2], Сюрдо А.И.[1, 2]
[1)] Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Уральский Федеральный Университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: boyarincev.alex@gmail.com

LUMINESCENT PROPERTIES OF POWDERS OF ANION-DEFECTIVE CORUNDUM

Boyarintsev A.I.[1, 2], Abashev R.M.[1, 2], Surdo A.I.[1, 2]
[1)] M.N. Mikheev Institute of Metal Physics, Yekaterinburg, Russia
[2)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The dependences of the response of thermo- and optically stimulated luminescence

(TL and OSL) on the particle size of the anion-defective corundum powder were studied. The dependences of the OSL and TL responses on the ratio of the particle size and the thickness of the sensitive layer were obtained

Монокристаллический анионодефицитный корунд (α-$Al_2O_{3-\delta}$) является одновременно люминесцентно-активным и радиационно-чувствительным материалом. Считывание информации о дозе облучения возможно в нем с использованием эффектов термически и оптически стимулированной люминесцентной (ТЛ и ОСЛ). Наряду с монокристаллической широкое применение для изготовления ОСЛ- детекторов находит поликристаллическая форма α-$Al_2O_{3-\delta}$. Для более равномерного распределения порошкообразного ОСЛ-активного материала на пластиковой подложке с дальнейшим формированием ОСЛ-пленок часто используется органические связующие вещества [1,2]. Подобные ОСЛ-дозиметрические пленки находят применение не только в индивидуальной дозиметрии фотонного и бета-излучений, но и в 2D-дозиметрии, которая уже сейчас применяется для определения с высоким разрешением распределения дозы облучения в органах и тканях человека при радиационной терапии, а также для формирования скрытого изображения при радиационном контроле [1]. Более того, добавляя в состав пленки нейтрон-конверсионные материалы на основе ^{6}Li и ^{10}B, можно создать ОСЛ-дозиметры, позволяющие измерять нейтронную и гамма-составляющую в смешанных радиационных полях [1].

Порошкообразный α-$Al_2O_{3-\delta}$ для ОСЛ-пленок получают путем измельчения монокристаллов α-$Al_2O_{3-\delta}$ в шаровых мельницах. В результате получаются кристаллиты с размером от 10 до 200 мкм и с максимумом распределения,

зависящим от режимов работы мельницы, ее конструкции и времени размалывания. В литературе имеются достаточно подробные сведения о зависимости ТЛ-выходов от размеров зерна α-$Al_2O_{3-\delta}$ [3], но крайне скудные аналогичные данные об ОСЛ-выходах [4]. Неисследованными также являются зависимости ОСЛ-выходов от соотношения размеров кристаллитов и толщины чувствительного слоя, состоящего из α-$Al_2O_{3-\delta}$. Поэтому целью данной работы является подробное изучение ОСЛ-выхода от размера кристаллитов α-$Al_2O_{3-\delta}$ и соотношения их размера и толщины чувствительного слоя из α-$Al_2O_{3-\delta}$.

На рис.1 приведена зависимости ОСЛ- и ТЛ- выходов образцов порошкообразного α-$Al_2O_{3-\delta}$ от среднего размера кристаллитов d, определенного результатами микроскопических исследований. Видно, что с ростом d от 10 до 120 мкм они резко возрастают более чем 3,5 раза. При дальнейшем увеличении d ОСЛ- и ТЛ- выходы изменяются незначительно.

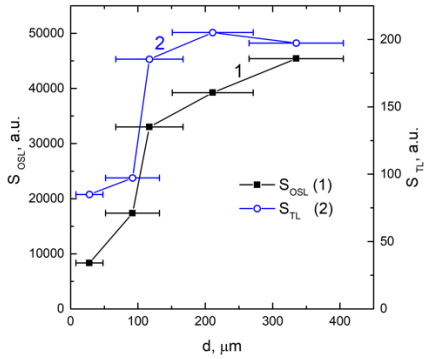


Рис. 1. ОСЛ- и ТЛ-выходы (кривые 1 и 2) детекторов в форме порошка из анионодефицитного корунда от среднего размера зерна d

Полученные результаты ОСЛ- и ТЛ- исследований свидетельствуют о том, что люминесцентная активность детекторов в форме порошка из α-$Al_2O_{3-\delta}$ связана с размером зерна. Кроме того, в работе будут представлены данные зависимости ОСЛ- и ТЛ- выходов от размера кристаллитов α-$Al_2O_{3-\delta}$ и соотношения их размера и толщины чувствительного слоя из α-$Al_2O_{3-\delta}$.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «Диагностика», № 122021000030-1).

1. E.G. Yukihara, S.W.S McKeever Optically Stimulated Luminescence: fundamentals and applications, John Wiley & Sons Ltd (2011)
2. E.A. Sanches et al, Materials Research, 18(1), 113-120 (2015)
3. M.S. Akselrod, V.S. Kortov, E.A. Gorelova Rad. Prot. Dos., 47(1-4), 159–164 (1993)
4. Hu Ke-Yan et al, Acta Phys. Sin. 61(15), 157802 (2012)

ВЛИЯНИЕ ТЕРМОМАГНИТНОЙ ОБРАБОТКИ НА АНИЗОТРОПИЮ ГИСТЕРЕЗИСНЫХ СВОЙСТВ ТОНКИХ ПЛЕНОК Ni

Быкова А.А.[1], Горьковенко А.Н.[1], Васьковский В.О.[1, 2]
[1)] Уральский федеральный университет им. Первого Президента России Б. Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
[2)] Институт физики металлов имени М. Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
E-mail: nastyabykowa@gmail.com

EFFECT OF THERMOMAGNETIC TREATMENT ON ANISOTROPY OF HYSTERESIS PROPERTIES OF Ni THIN FILMS

Bykova A.A.[1], Gorkovenko A.N.[1], Vaskovskiy V.O.[1, 2]
[1)] Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia
[2)] Institute of Metal Physics, Ural Branch of Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russia

The effect on magnetic properties of competitive types of anisotropy - a structural anisotropy and a magnetoelastic anisotropy has been observed in thin nickel-based films. In this work analysis was carried out to the observed complex magnetic anisotropy depending on a thermomagnetic treatment.

Магнитная анизотропия относится к числу важнейших свойств магнитоупорядоченных веществ, фактически определяя сферу их практического применения. В большой мере это относится к тонким магнитным плёнкам, в которых в силу специфических размерных и структурных характеристик, а также наличия подложки, как правило, реализуются несколько источников анизотропии. К числу таких объектов, в частности, принадлежат плёнки сплавов на основе никеля, которым уделено значительно исследовательское внимание. При этом плёнки самого никеля изучены относительно слабо, хотя наличие отрицательной магнитострикции является интересной предпосылкой для контролируемого варьирования свойств плёнок посредством упругих напряжений [1,2]. Выявление роли таких напряжений в формировании магнитной анизотропии представляется важным с точки зрения как фундаментальных, так и прикладных задач. Данная работа посвящена изучению анизотропии гистерезисных свойств тонких поликристаллических плёнок Ni.

Исследовались образцы трёх типов: glass/Ni, glass/Ni/Ta, glass/Ta/Ni/Ta, где glass – стеклянные подложки Corning, Ta – дополнительные танталовые покрытия толщиной 5 нм. Они были получены методом магнетронного распыления на установке Orion 8. Формирование пленок происходило в присутствии однородного магнитного поля (технологическое поле) напряжённостью 250 Э, которое было ориентировано параллельно плоскости образцов. Толщина слоёв Ni во всех образцах составляла 40 нм. Термомагнитная обработка состояла в накапливающемся отжиге плёнок в магнитном поле

напряжённостью 250 Э при последовательном увеличении температуры в интервале 200-400°С и выдержке при каждой температуре в течение 1 часа.

На рисунке представлены угловые зависимости коэрцитивной силы Hc(θ), измеренные в плоскости исследовавшихся образцов. Они отражают наличие сложной магнитной анизотропии, параметры которой изменяются в зависимости от материала поверхности, на которую осаждается плёнка, и температуры отжига. В работе выполнен анализ возможных механизмов магнитной анизотропии, обуславливающих установленную специфику гистерезисных свойств.

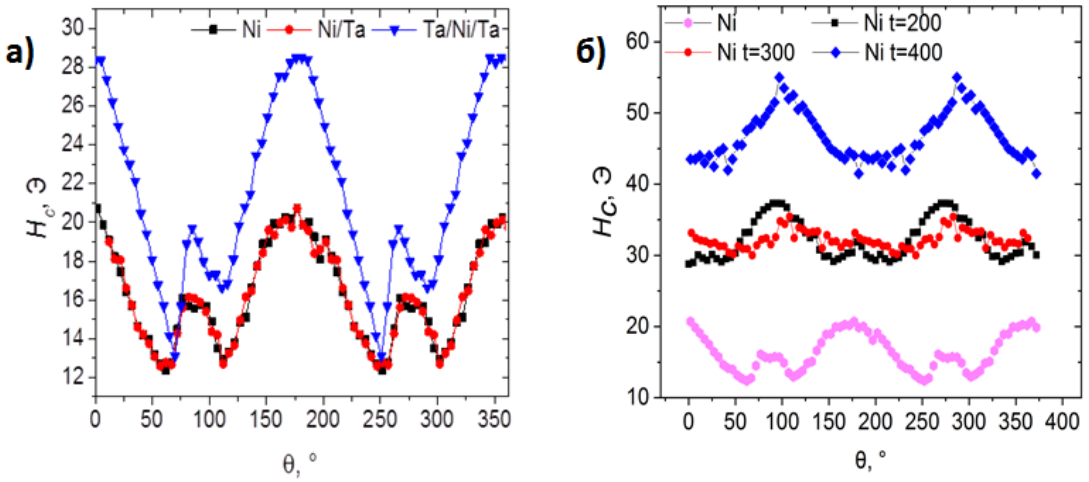


Рис. 1. Угловые зависимости коэрцитивной силы пленок никеля до (а) и после (б) термомагнитных обработок

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки РФ, проект FEUZ 2023 -0020.

1. Coey J. M. Magnetism and magnetic materials // Cambridge university press (2010).
2. Sander D. The correlation between mechanical stress and magnetic anisotropy in ultrathin films // Reports on Progress in Physics., №. 5. p. 809 (1999).

ОСОБЕННОСТИ СПЕКТРАЛЬНО-РАЗРЕШЕННОЙ ТЕРМОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ В НАНОВИСКЕРАХ НИТРИДА АЛЮМИНИЯ

Чайкин Д.В.[1], Спиридонов Д.М.[1], Вохминцев А.С.[1], Вайнштейн И.А.[1, 2]
[1)] НОЦ НАНОТЕХ, УрФУ, Екатеринбург, Россия
[2)] Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия
E-mail: d.v.chaikin@urfu.ru

FEATURES OF SPECTRAL-RESOLVED THERMOLUMINESCENCE IN ALN NANOWHISKERS

Chaikin D.V.[1], Spiridonov D.M.[1], Vokhmintsev A.S.[1], Weinstein I.A.[1, 2]
[1)] NANOTECH Centre, Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia
[2)] Institute of Metallurgy of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russia

AlN nanowhiskers were studied using spectrally resolved thermoluminescence (SR-TSL) technique. SR-TSL response was analyzed in synthesized samples after UV irradiation in the temperature range of 77–623 K. The origin of observed luminescence response in UV irradiated AlN nanowhiskers was discussed.

Нитевидные нанокристаллы или нановискеры на основе различных соединений III-V групп могут обеспечить различные преимущества при разработке современных функциональных сред для наноразмерных эмиттеров и детекторов оптического излучения, химических и биологических наносенсоров и т.д. Благодаря широкой запрещенной зоне более 6 эВ, 1D- и 2D-структуры нитрида алюминия могут использоваться для создания новых термо- и химически стабильных устройств нанофотоники и оптоэлектроники ультрафиолетового и видимого диапазонов. В настоящей работе выполнено исследование спектрально-разрешенной термостимулированной люминесценции (ТСЛ) в УФ-облученных нановискерах AlN в широком температурном диапазоне.

Образцы были синтезированы путем одновременной обработки жидкого алюминия газообразным фторидом алюминия и азотом при конденсации на подложке поликристаллического нитрида алюминия. Выращенные образцы имеют средний диаметр 70 нм и аспектное соотношение более 100.

Измерение экспериментальных зависимостей спектрально-разрешённой ТСЛ проводилось с помощью установки, состоящей из охлаждающей системы Linkam LNP96-S, сопряжённой со спектрографом Shamrock SR-303i-B и регистрирующей ПЗС-матрицей Newton^{EM} DU970P-BV-602 (Andor). Предварительно образцы охлаждались до температуры жидкого азота (77 K), после чего в течение 10 минут облучались УФ-излучением 275 нм. Регистрация спектров ТСЛ проводилась в температурном диапазоне 77–623 K с частотой 1 Гц

при скорости линейного нагрева 0.5 K/c. В процессе нагрева получена серия из 1100 спектров в диапазоне 300–850 нм.

Измеренные зависимости интенсивности ТСЛ от температуры и длины волны были представлены виде 3D-графика. Показано, что ТСЛ отклик характеризуется широким пиком в области 100–200 K, а также менее интенсивным и более узким максимумом при 300 K. При этом указанные температурные пики полностью высвечивается при нагреве выше 425 K. Установлено, что спектральный состав ТСЛ свечения с максимумом около 475 нм хорошо согласуется со спектрами фото-, термо- и электролюминесценции наноструктур AlN, которые были изучены нами ранее и приписаны кислород-связанным центрам и азотным вакансиям V_N, а также к электронно-оптическим процессам с участием (V_{Al} – O_N)-комплексов [1-3]. С использованием полученных данных рассчитаны спектрально-кинетические параметры и энергетические характеристики механизмов термостимулированных процессов, протекающих в исследуемых нановискерах нитрида алюминия после воздействия УФ излучения.

Работа выполнена при поддержке научного проекта Минобрнауки РФ FEUZ-2023-0014.

1. Spiridonov D.M., Weinstein I.A., Chaikin D.V., Vokhmintsev A.S., Afonin Yu.D., Chukin A.V., Radiat Meas, 122, 91 (2019)
2. Weinstein I.A., Vokhmintsev A.S., Chaikin D.V., Afonin Yu.D., Opt Mater, 61, 111 (2016)
3. Vokhmintsev A.S., Weinstein I.A., Chaikin D.V., Spiridonov D.M., Afonin Yu.D., Funct Mater, 21, 1, 21 (2014)

ОСОБЕННОСТЬ РАСПРОСТРАНЕНИЯ СВЕТОВЫХ ПУЛЬ В АНИЗОТРОПНОМ ФОТОННОМ КРИССТАЛЕ ПРИ ТУНЕЛЬНОЙ ИОНИЗАЦИИ

Челнынцев И.А.[1], Шилов Т.Б.[1], Двужилова Ю.В.[1]
[1)] Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования “Волгоградский государственный университет”
E-mail: nim-221_473718@volsu.ru

THE PECULIARITY OF THE PROPAGATION OF LIGHT BULLETS IN AN ANISOTROPIC PHOTONIC CRYSTAL DURING TUNNEL IONIZATION

Chelnyntsev I.A.[1], Shilov T.B.[1], Dvizhilova Y.V.[1]
[1)] Federal State Autonomous Educational Institution of Higher Education “Volgograd State University”

This paper presents the results of numerical simulation of three-dimensional light bullets that propagate in the medium of an array of semiconductor carbon nanotubes, which has a spatially modulated refractive index, taking into account the external pumping field and tunnel ionization.

В представленной работе фотонный кристалл определяется как среда из углеродных нанотрубок, с пространственной модуляцией показателя преломления. Низкие пороги нелинейных эффектов в фотонных кристаллах культивируют изучение новейших подлинных методов управления распространением электромагнитного излучения в этих средах.

Под воздействием накачки внешнего магнитного поля понимается процесс перекачки энергии внешнего источника в среду УНТ. Под световыми пулями, в работе понимаются предельно короткие импульсы фемтосекундной длительности, содержащие 1–5 периодов колебания электрического поля. Энергия таких импульсов находится в ограниченной пространственной области, а также они обладают высокой направленностью их излучения, сопротивлением к возмущениям и неизменностью формы [1 – 3]. Причем, пространственная модуляция показателя преломления фотонного кристалла, является уникальной средой, обладающей нелинейными свойствами, в которой возможно устойчивое распространение локализованных солитоноподобных импульсов [4].

При взаимодействии интенсивного лазерного излучения с атомами образуются динамические резонансы, индуцируемые этим излучением, которые отсутствуют в невозмущённом атоме. Из-за этого образуется нелинейность процесса ионизации атома.

Нелинейность, необходимую для стабилизации световых пуль, вносит массив полупроводниковых углеродных нанотрубок (УНТ), располагающий нелинейными особенностями в оптической области распространения [5].

Геометрическая составляющая предполагает, что импульс распространяется в направлении оси аппликат, в этом же направлении показатель преломления фотонного кристалла имеет пространственную модуляцию. Вектор-потенциал электрического поля световой пули направлен под углом к оси УНТ, таким образом фотонный кристалл можно рассматривать, как анизотропную среду.

Параметр накачки внешним магнитным полем был выбран в виде функции Гаусса высшего порядка. Вероятность туннельной ионизации рассчитывается при прохождении предельного короткого оптического импульса через массив УНТ. Стандартное значение угла между осью УНТ и вектором напряженности электрического поля импульса было взято за 60°.

Плотность тока образуется благодаря взаимодействию поля импульса с электронами в зоне проводимости нанотрубок. В нём же распределительная функция в начальный момент времени совпадает с распределяющей функцией Ферми.

Эволюция напряженности трехмерной световой пули в оптически анизотропном фотонном кристалле из УНТ, с учетом внешней накачки и туннельной ионизации показана на рисунке 1.

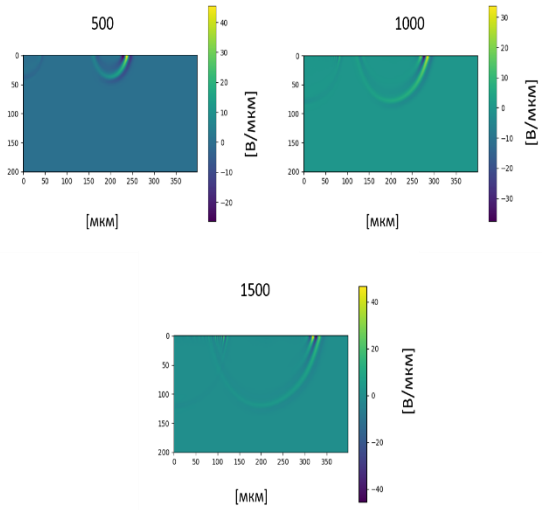


Рис. 1. Эволюция оптических импульсов в среде ориентированных УНТ, в различные моменты времени (5 пс, 10 пс, 15 пс). По осям отложены относительные единицы координат (мкм) и электрического поля (В/мкм).

Из результатов численного моделирования становится доступным рассуждение о том, что импульс с течением времени распространяется устойчиво. Оптимальное изменение параметров туннельной ионизации достигается только при 60 °, в остальных случаях максимумы и минимумы повторяются независимо от значений выбранного числа.

1. Fibich, G., B. Ilan. Optical light bullets in a pure Kerr medium // Optics Letters, Vol. 29, № 8, P. 887–889, (2004)

2. Mihalache, D. Multidimensional localized structures in optical and matter-wave media: a topical survey of recent literature // Romanian Reports in Physics, Vol. 69, P. 403, (2017)
3. Mihalache D. Localized structures in optical and matter-wave me-dia: a selection of recent studies // Romanian Reports in Physics, Vol. 73, P. 403, (2021)
4. Sazonov S. V., Ustinov N. V. Propagation of few-cycle pulses in a nonlinear medium and an integrable generalization of the sine - Gordon equation // Physical Review, Vol. 98, P. 063803, (2018)
5. Eletskii A. V. Carbon nanotubes // Physics – Uspekhi, Vol. 40, P. 899, (1997)

АНОМАЛИИ ЭЛЕКТРОННОЙ ТЕПЛОЕМКОСТИ ПРИ ФАЗОВОМ ПЕРЕХОДЕ В КИРАЛЬНОМ ФЕРРОМАГНЕТИКЕ MnSi

Черникова М.А.[1], Повзнер А.А.[1], Волков А.Г.[1], Ноговицына Т.А.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого президента России Б.Н. Ельцина
E-mail: batman_0685@mail.ru

THE ANOMALIES OF ELECTRONIC HEAT CAPACITY DURING PHASE TRANSITION IN CHIRAL FERROMAGNET MnSi

Chernikova M.A.[1], Povzner A.A.[1], Volkov A.G.[1], Nogovitsyna T.A.[1]
[1)] Ural Federal Univercity

The electronic spectrum and DoS of MnSi have been calculated. It is shown that the free energy of the A-phase of MnSi contains an additional contribution related to the topological features of the spectrum. Calculations of the electronic heat capacity are performed.

Показано, что при фазовых переходах в ферромагнетиках с взаимодействием Дзялошинского-Морийя (ДМ) возникают пространственные флуктуации, связанные с топологической кривизной Берри. Термодинамические границы устойчивости киральных микроструктур определяются характерным для топологических материалов изменением знаков кривизны плотности d-электронных состояний. В скирмионной А-фазе, возникающей после перехода из фазы параметра порядка, реализуются флуктуации спирали. При переходе в парамагнитное состояние возникает сегрегация фаз с флуктуациями спиновых спиралей разной киральности.

Расчеты электронного спектра и плотности состояний MnSi выполнены в методе GGA+U. Показано, что свободная энергия А-фазы MnSi содержит дополнительный вклад пространственных флуктуаций спиновой и зарядовой электронной плотности, связанный с топологическими особенностями электронного спектра. Проведенные расчеты электронной теплоемкости и их сравнение с экспериментальными данными [1] показывают, что аномальная скирмионная фаза формируется в области наблюдаемого на эксперименте «плеча» на зависимости Cv(T), а область сегрегации фаз приводит к формированию на этой зависимости широкого температурного минимума, который сменяется линейным ростом в парамагнитной области температур. Эти результаты согласуются с экспериментом по неупругому рассеянию поляризованных нейтронов [2].

1. Stishov S.M., Petrova A.E., Khasanov S., Panova G.Kh , Shikov A.A., Lashley J.C., Wu D., Lograsso T.A., Phys. Rev. B, V.76 , P.1-4 , (2007)
2. Janoschek M., Garst M., Bauer A., Krautscheid P., Georgii R., Boni P., Pfleiderer C., Phys. Rev. B., P. 1-16, (2013)

КАРТИРОВАНИЕ ОТНОСИТЕЛЬНОЙ ЭНЕРГИИ ГРАНИЦ ЗЕРЕН УЛЬТРАМЕЛКОЗЕРНИСТОЙ МЕДИ НА ОСНОВЕ ДАННЫХ СКАНИРУЮЩЕЙ ТУННЕЛЬНОЙ МИКРОСКОПИИ

Чикунова Н.С.[1], Столбовский А.В.[1], Мурзинова С.А.[1], Фалахутдинов Р.М.[1], Блинов И.В.[1], Истомина А.Ю.[1]

[1)] Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук
E-mail: chikunova@imp.uran.ru

RELATIVE GRAIN BOUNDARY ENERGY MAPPING OF ULTRAFINE GRAINED COPPER BASED ON SCANNING TUNNELING MICROSCOPY DATA

Chikunova N.S.[1], Stolbovsky A.V.[1], Murzinova S.A.[1], Falahutdinov R.M.[1], Blinov I.V.[1], Istomina A.Yu.[1]

[1)] M.N. Mikheev lnstitute of Metal Physics of Ural Branch of Russian Academy of Sciences, 620137, Ekaterinburg, Russia

The method of mapping the relative energy of grain boundaries in ultrafine-grained metallic materials based on the analysis of scanning tunneling microscopy (STM) data is suggested. The STM data on the etching relief of copper after five revolution of high pressure torsion are analyzed.

Изучение объемных металлических материалов с ультрамелкозернистой (УМЗ) структурой, полученных с использованием методов интенсивной пластической деформации (ИПД), представляет большой интерес в связи с улучшенными прочностными характеристиками по сравнению с их крупнозернистыми аналогами [1]. Считается, что границы зерен (ГЗ) являются основным элементом структуры, влияющим на характеристики объемных металлических материалов. При этом деформационно-модифицированные ИПД структуры обладают сложной иерархией структурных элементов и интерфейсов [2]. Поэтому анализ параметров как зёренной структуры, так и состояния ГЗ с целью определения параметров и их взаимосвязи привлекает повышенное внимание [3]. Однако, оценка относительных энергий границ зёрен связана с формированием границ термического травления [4]. Поэтому, для исследования УМЗ материалов в работе [5] был предложен подход, основанный на использовании химического травления и сканирующей туннельной микроскопии (СТМ), что позволяет оценивать относительную энергию границ зёрен в материалах без дополнительного термического воздействия.

Однако используемые методики позволяют проводить только качественный анализ структуры и определять среднее значение энергии границ, формирующих данную структуру. Поэтому в данной работе ставилась задача предложить

подходы, позволяющие связать измерения относительных энергий границ зёрен непосредственно со структурными элементами.

В качестве модельного материала для исследования была выбрана медь М1 чистотой 99,9%, подвергнутая сдвигу под давлением 4 ГПа в наковальнях Бриджмена на 5 оборотов при комнатной температуре, что обеспечило выход на стадию стационарного формирования структуры. Подготовка поверхности образцов и съёмка СТМ осуществлялась по методике работы [5].

Обработка СТМ-изображений поверхности травления производилась на специально разработанном программном обеспечении с применением алгоритмов определения областей, соответствующих канавкам травления с автоматизированным определением относительной энергии границы по формуле [4], что позволило избежать обработки изображений вручную и связать структурные элементы с картой относительных энергий интерфейсов (Рис. 1).

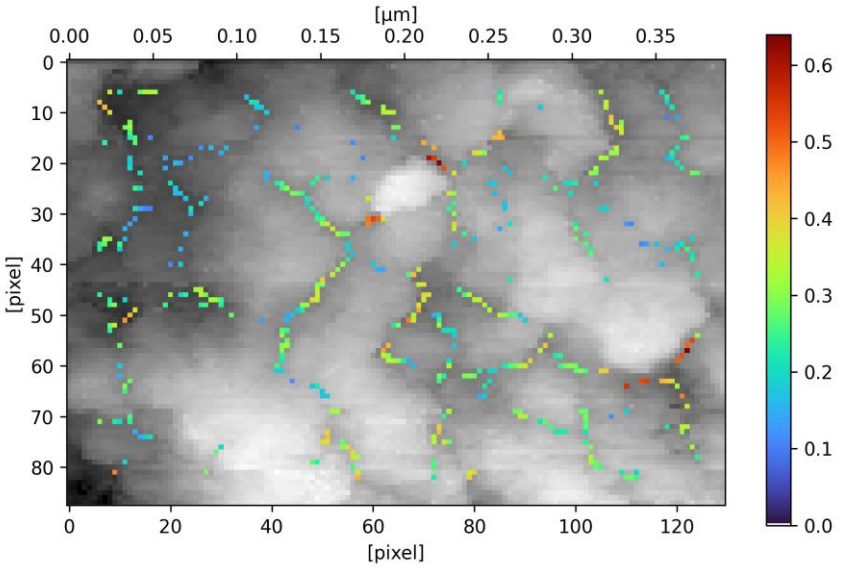


Рис. 1. Карта относительных энергий границ зерен, совмещенная с СТМ-изображением поверхности травления УМЗ меди

С помощью предложенной методики можно охарактеризовать состояние структуры материала. Рельеф поверхности представлен участками в градациях серого цвета в зависимости от глубины, что позволяет чётко выделить более дефектные и менее дефектные области структуры. Кроме того, составление карт энергии границ зерен позволяет получить данные об относительной энергии в каждой точке границы зерна.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «Функция», № 122021000035-6).

1. Valiev R.Z., Islamgaliev R.K., Alexandrov I.V., Progress in Materials Science 45, 103 (2000)

2. Divinski S.V., Diffusion Foundations 5, 57 (2015)
3. Zimmerman J., Sharma A., Divinski S.V., Rabkin E., Scripta Materialia 182, 90 (2020)
4. Saylor D., Rohrer G., Journal of The American Ceramic Society 82, 1529 (1999)
5. Kuznetsov P.V., Rakhmatulina T.V., Belyaeva I.V., Korznikov A.V., Physics of Metals and Metallography 118, 241 (2017)

ИССЛЕДОВАНИЕ ИНТЕРКАЛЯЦИОННОЙ СИСТЕМЫ $Fe_{1/3}TiS_2$ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЭВОЛЮЦИОННЫХ АЛГОРИТМОВ И ПЕРВОПРИНЦИПНЫХ РАСЧЁТОВ

Чубарова А.А.[1], Мамонова М.В.[1], Кемпф Л.А.[1]
[1)] Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского, г.Омск, Россия
E-mail: ChubarovaAA@stud.omsu.ru

STUDY OF THE $Fe_{1/3}TiS_2$ INTERCALATION SYSTEM USING EVOLUTIONARY ALGORITHMS AND FIRST-PRINCIPLE CALCULATIONS

Chubarova A.A.[1], Mamonova M.V.[1], Kempf L.A.[1]
[1)] F.M. Dostoevsky Omsk State University, Omsk, Russia

The Fe_xTiS_2 intercalation system with atom Fe concentration x=1/3 was studied using first-principle calculations and evolutionary algorithms. Calculations were performed for a single unit cell for various magnetic and nonmagnetic configurations with changes in the shape and volume of the unit cell.

Интеркаляционные соединения переходных металлов относятся к материалам, обладающих большим значением коэффициента магнитосопротивления, чем вызывают большой интерес для исследования в физике конденсированного состояния [1,2]. Интеркаляция - введение «гостевых» атомов, ионов или молекул между слоями слоистых соединений, и результирующие вещества, полученные в процессе интеркаляции, называются «интеркаляционными соединениями» или «интеркалатами». Интеркалаты, содержащие атомы переходных металлов, типа Fe_xTS_2, где T = Ti или Ta, проявляют различные магнитные состояния в зависимости от концентрации интеркалируемого железа [3].

В данной работе проводилось исследование интеркаляционного соединения Fe_xTiS_2 с концентрацией атомов железа x = 1/3 с применением первопринципных расчётов [4] и эволюционных алгоритмов программного комплекса USPEX [5].

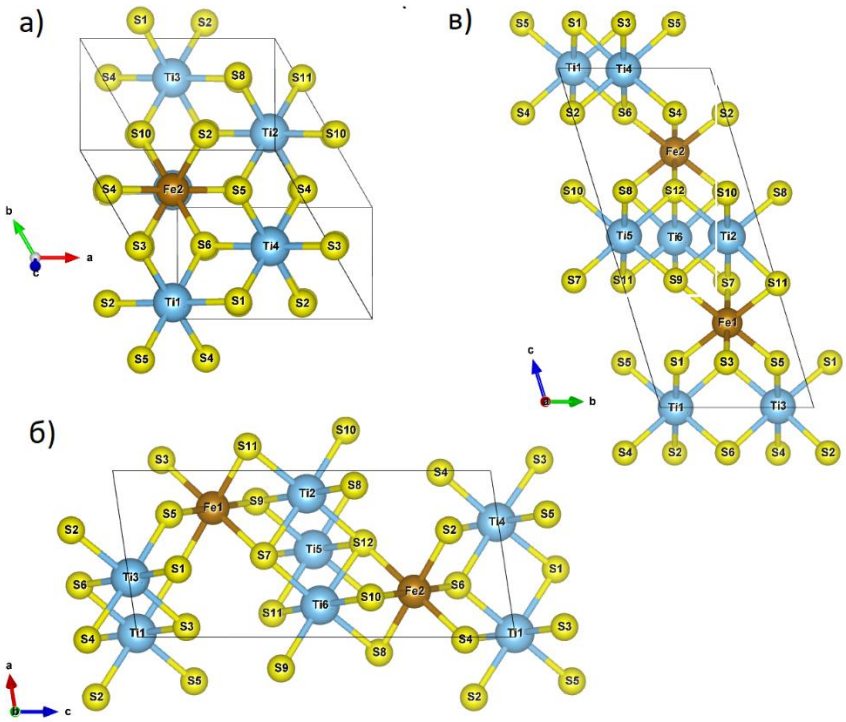


Рис. 1. Вариант лучшей структуры, выбранный эволюционным алгоритмом с применением программы оптимизации VASP в разных проекциях.

По результатам проведенных расчётов были получены кристаллические структуры с помощью алгоритмов USPEX и первопринципных расчётов для немагнитной и различных магнитных конфигураций. Предсказаны кристаллические структуры при учёте изменения формы и объёма элементарной ячейки. При исследование немагнитной конфигурации (рис. 1) была получена структура, у которой наблюдается сохранение октаэдральной формы соединения TiS_2 и FeS_2, изменения угла в проекции координатной оси C, незначительное смещение атомных слоёв в ячейки. При исследование магнитных конфигураций выявлено нарушения октаэдральной формы соединений, аномально большие значения магнитных моментов Ti, превышающие магнитные моменты атомов Fe.

Исследования проведены с использованием ресурсов Центра коллективного пользования научным оборудованием «Центр обработки и хранения научных данных ДВО РАН», финансируемого Минобрнауки России по соглашению № 075-15-2021-663.

1. McGuire T. , Potter R.L., IEEE Trans. on Magn, 11, 1018, (1975)
2. Motizuki K., Suzuki N., Springer Series in Materials Science, 27, 106–138, (1994)
3. Choe J., Lee K., Huang C.L., Trivedi N., Morosan E., Phys. Rev., 99, 064420, (2019)
4. Kresse P.G., Furthmuller J., Phys. Rev., 54, 11169, (1996)
5. Lyakhov A.O., Oganov A.R., Valle M., Comp. Phys. Comm., 181, P. 1623 – 1632, (2010)

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СТЕКОЛ И СТЕКЛОКЕРАМИКИ НА ОСНОВЕ $LiGe_2(PO_4)_3$

Давлетчин Е.Д.[1], Першина С.В.[2], Вайнштейн И.А.[1, 3], Власов М.И.[1, 2]
[1)] НОЦ НАНОТЕХ, Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия
[2)] Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[3)] Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия
E-mail: davletchin.e@mail.ru

OPTICAL PROPERTIES OF GLASSES AND GLASS-CERAMICS BASED ON $LiGe_2(PO_4)_3$

Davletchin E.D.[1], Pershina S.V.[2], Weinstein I.A.[1, 3], Vlasov M.I.[1, 2]
[1)] NANOTECH Centre, Ural Federal University Yekaterinburg, Russia
[2)] Institute of High-Temperature Electrochemistry of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia
[3)] Institute of Metallurgy of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia

Optical properties of $LiGe_2(PO_4)_3$ doped by alumina are studied. The observed blue shift of the absorption edge is analyzed taking into account substitution processes in the glass forming structure.

В настоящее время литий-ионные аккумуляторы являются наиболее популярными системами хранения энергии для широкого спектра портативной электроники. Они также обладают высоким потенциалом для крупномасштабных применений, включая системы хранения солнечной и ветровой энергии, электрические и гибридные транспортные средства. Однако существует и ряд проблем, связанных с безопасностью, стабильностью батареи, невозможностью обеспечить большим количеством энергии новые технологии, и одна из причин этого связана с использованием жидкого или полимерного электролита в таких аккумуляторах [1]. Чтобы устранить эти недостатки предлагается совершить переход от жидких электролитов к твердым [1]. Одним из материалов, перспективных для этих целей, является $LiGe_2(PO_4)_3$. Он обладает такими преимуществами, как: отличная стабильность на влажном воздухе; не взаимодействует с CO_2; не свойственны выделения вредных газов или образование Li_2CO_3; низкая стоимость и простота в изготовлении [1].

В большей степени, на ионную проводимость твердых электролитов, которая является одним из наиболее важных характеристик, оказывают влияние структурные особенности этих материалов, однако роль электронной структуры в процессах проводимости изучена недостаточно. В этой связи, в данной работе проведено рассмотрение особенностей спектров оптического поглощения материалов на основе $LiGe_2(PO_4)_3$, так как они отражают состояние электронной структуры вблизи валентной зоны материала. Также изучено влияние

допирования алюминием по подрешетке германия, а также проведено сравнение спектров поглощения данного материала в стеклообразном и кристаллическом состояниях.

Синтез стеклокерамических образцов состава $LiGe_2(PO_4)_3$ (LGP) и $Li_1.5Ge_1.5Al_0.5(PO_4)_3$ (LAGP) выполнен путем направленной кристаллизации стекол составов $12.50Li_2O$-$50GeO_2$-$37.50P_2O_5$ и $18.75Li_2O$-$6.25Al_2O_3$-$37.5GeO_2$-$37.50P_2O_5$ соответственно, которые получали методом закаливания расплава [2].

Измерения спектров оптического поглощения для стеклообразных материалов проведены на образцах размером 4х4 мм в геометрии «на просвет», для стеклокерамики – на порошкообразных образцах методом диффузного рассеяния света.

Полученные спектры оптического поглощения для стекол LGP и LAGP представлены на рисунке 1. Показано, что частичное замещение оксида германия на оксид алюминия приводит к смещению края оптического поглощения материала в ультрафиолетовую область. Это может быть связано с тем, что в стекле GeO_2 частично замещается на Al_2O_3, который является более широкозонным диэлектриком с шириной оптической щели 9,4 эВ [3].

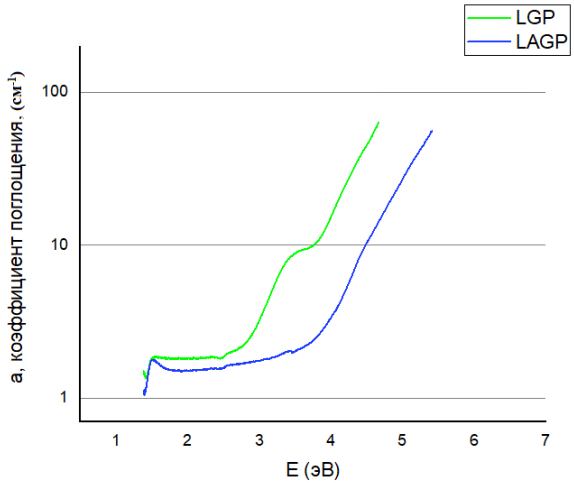


Рис.1 – Спектр оптического поглощения стеклообразных LGP и LAGP.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-73-00261, https://rscf.ru/project/22-73-00261Ф

1. Po Hsuen Kuo, Jincheng Du / Lithium Ion Diffusion Mechanism and Associated Defect Behaviors in Crystalline $Li_{1+x}Al_xGe_{2-x}(PO_4)_3$ Solid-State Electrolytes // The Journal of Physical Chemistry C. 2019. doi:10.1021/acs.jpcc.9b08390
2. S. V. Pershina & A. A. Pankratov & E. G. Vovkotrub & B. D. Antonov / Promising high-conductivity $Li_{1.5}Ge_{1.5}Al_{0.5}(PO_4)_3$ solid electrolytes: the effect of crystallization temperature on the microstructure and transport properties // Ionics. 2019. doi:10.1007/s11581-019-03021-5
3. А.Б. Кулинкин, С.П. Феофилов, Р.И. Захарченя / Люминесценция примесных 3d- и 4f-ионов в различных кристаллических формах Al_2O_3 // Журнал "Физика Твердого Тела" 2000.

ФОТОСОРБЦИОННЫЕ СВОЙСТВА НАНОРАЗМЕРНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУР g-C_3N_4/TiO_2 ПО ОТНОШЕНИЮ К ИОНАМ ГАЛЛИЯ

Дорошева И.Б.[1], Печищева Н.В.[1, 2], Зайцева П.В.[1, 2], Ремпель А.А.[1]
[1)] Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург
[2)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: i.b.dorosheva@urfu.ru

PHOTOSORPTION PROPERTIES OF NANOSIZED g-C_3N_4/TiO_2 HETEROSTRUCTURES TO ADSORB GALLIUM IONS

Dorosheva I.B.[1], Pechishcheva N.V.[1, 2], Zaitseva P.V.[1, 2], Rempel A.A.[1]
[1)] Institute of Metallurgy of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia
[2)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The g-C_3N_4/TiO_2 nanoheterostructures were synthesized with initial ratio $C_3H_6N_6$ and TiO_2 4:1; 6:1 and 8:1. The obtained samples were characterized by XRD, SEM, BET and DRS. The Ga (III) ions photosorption under UV- and visible light was studied from aqueous solutions with Ga concentrations 2 - 10 mg/l

Среди неорганических сорбентов перспективным является диоксид титана (TiO_2), поскольку является химически стабильным, нетоксичным, доступным и недорогим. Однако ширина запрещенной зоны TiO_2 делает его активным лишь под УФ излучением. Модификация структуры графитоподобным нитридом углерода (g-C_3N_4) позволяет сдвинуть край поглощения объекта в длинноволновую область, что может повысить эффективность сорбции в видимом солнечном диапазоне. В связи с этим, целью данной работы является синтез и аттестация гетероструктуры g-C_3N_4/TiO_2 путем полимеризации меламина ($C_3H_6N_6$) в присутствии TiO_2 в различных пропорциях исходных веществ.

Синтез наночастиц TiO_2 осуществлялся золь-гель методом с использованием тетрабутоксититана $Ti(C_4H_9O)_4$ (ОСЧ 7-5), этилового спирта C_2H_5OH (95%) и дистиллированной воды H2Одист в объемном соотношении 1:1:4. Получение g-C3N4 происходило путем полимеризации $C_3H_6N_6$ (Aldrich, 99%) на воздухе при 550 °C в течение 5 часов. Синтез гетероструктуры g-C_3N_4/TiO_2 происходил при смешивании $C_3H_6N_6$, TiO_2 и $H_2O_{дист}$ в пропорциях 4:1:40; 6:1:40 и 8:1:40 по массе в стакане при воздействии ультразвуком с последующей полимеризацией по вышеуказанной технологии. Сорбция ионов галлия из водных растворов с концентрацией Ga от 2 до 10 мг/л выполнена в среде $NaNO_3$ при pH=3, при массовом соотношении сорбент/раствор 1:1250 под действием УФ- и видимого света с последующим отделением сорбента от раствора центрифугированием при 8000 об/мин. в течение 15 минут.

Рентгенофазовый анализ (РФА) выполнен в CuKα1,2 излучении на автодифрактометре D8 ADVANCE. Удельная площадь поверхности синтезированных образцов определена методом БЭТ с использованием анализатора Gemini VII 2390 с предварительной дегазацией при 150 ºС. Исследование морфологии наноструктур и химического состава энергодисперсионной рентгеновской спектроскопией (ЭРС) выполнено на сканирующем электронном микроскопе (СЭМ) SIGMA VP (CarlZeiss). Ширина запрещенной зоны (Eg) рассчитывалась с использованием функции Кубелки-Мунка по спектрам диффузного отражения, зарегистрированных на спектрофотометре FS-5 (Edinburgh Instruments). Определение содержания галлия в растворах после сорбции выполнялось на атомно-эмиссионном спектрометре с индуктивно-связанной плазмой Optima 2100 DV (PerkinElmer).

Исследование морфологии и химического состава на СЭМ показало образование агломератов g-C_3N_4/TiO_2, состоящих из частиц размером 20–100 нм. Измерения удельной площади поверхности образцов демонстрируют значения в диапазоне от 45 до 67 м2/г. Ширина запрещенной зоны Eg изменяется в диапазоне от 2.21 до 2.47 эВ. Степень сорбции галлия из раствора составила от 20 до 50 %.

Таким образом, гетероструктура графитоподобного нитрида углерода с диоксидом титана (g-C_3N_4/TiO_2) поглощает свет видимого диапазона (380–500 нм) благодаря более узкой ширине запрещенной зоны g-C_3N_4, однако не позволяет сорбировать ионы галлия с эффективностью более 50 %.

Исследование выполнено в рамках стипендии Президента РФ СП-3024.2021.1 и при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках Программы развития УрФУ «Приоритет-2030», проект № 122080100074-1.

1. Dorosheva I.B., Petrova S.A., Weinstein I.A., Rempel A.A. AIP Conference Proceedings (2022, 2466, 030021)

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ МАГНИТНЫХ И МАГНИТОРЕЗИТИВНЫХ СВОЙСТВ НАНОПРОВОЛОК Co В ТОНКОПЛЕНОЧНОЙ МАТРИЦЕ ОКСИДА АЛЮМИНИЯ

Дрягина А. Е.[1], Горьковенко А. Н.[1], Кулеш Н.А.[1], Васьковский В. О.[1, 2]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого президента России Б. Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
[2)] Институт физики металлов имени М. Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
E-mail: Anastasia.Driagina@urfu.me

SYNTHESIS AND INVESTIGATION OF MAGNETIC AND MAGNETORESISTIVE PROPERTIES OF Co NANOWIRES IN A THIN-FILM ALUMINA MATRIX

Dryagina A.E.[1], Gorkovenko A.N.[1], Kulesh N.A.[1], Vaskovski V.O.[1, 2]
[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia B.N.Yeltsin
[2)] Institute of Metal Physics, Ural Branch of Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russia

Samples of Co nanowires in a film of Al oxide with electrical contacts connected from both surfaces of the nanowire array were obtained. The magnetic and magnetoresistive properties of the samples were measured and analyzed.

Развитие методов синтеза обусловило рост интереса к магнитным наноструктурам, в том числе пленкам на криволинейной поверхности, трехмерным наноструктурам и нанопроволокам. Сильная анизотропия формы в сочетании с тонкой настройкой геометрии магнитных нанопроволок позволяет контролируемо модифицировать процессы перемагничивания, что открывает широкие возможности их практического использования [1]. Одним из наиболее перспективных методов исследования и влияния на магнитное состояние нанопроволок является пропускание электрического тока, что обуславливает интерес к возможности создания надежного электрического контакта. В данной работе предложена методика синтеза массива магнитных нанопроволок с возможностью создания электрических контактов на обеих торцевых поверхностях. В качестве шаблона используется пленка оксида алюминия, что позволяет получать структуры с модулированным диаметром или составом. В отличие от распространенных методов синтеза нанопроволок на постоянном токе [2], данный способ не требует использования сквозной мембраны и позволяет наносить массив нанопроволок как на проводящие, так и на диэлектрические или полупроводниковые поверхности.

В качестве основы для создания пористого шаблона использовались тонкие пленки высокочистого алюминия с подслоем титана на стеклянной подложке,

полученные методом ионного распыления. Подслой титана необходим для улучшения адгезивных свойств пленки. Матрицы были синтезированы методом анодирования алюминия при напряжении 40 В и комнатной температуре. На завершающем этапе анодирования для истончения барьерного слоя проводилось ступенчатое снижение тока [3], после чего образец выдерживался при минимальных значениях тока и напряжения. Для обеспечения прямого электрического контакта образец выдерживался в 5 % растворе ортофосфорной кислоты. Осаждение нанопроволок Co в готовые матрицы оксида алюминия выполнялось методом электролитического осаждения на постоянном токе.

Морфология образцов была исследована с помощью электронного микроскопа Tescan Mira3. Магнитные свойства полученных образцов были исследованы с помощью вибрационного магнетометра Lake Shore.

Анализ морфологии нанопроволок полученных в режиме постоянного тока, показал, что длина соответствовала заданному значению 1,6 мкм, а диаметр составил 56 нм. Анализ петель гистерезиса, полученных в направлении вдоль и перпендикулярно поверхности шаблона, подтвердил наличие выраженной оси легкого намагничивания параллельной оси нанопроволок.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования РФ, тема НИР FEUZ 2023-0020.

1. Fernández-Roldán J. A. Micromagnetism of cylindrical nanowires with compositional and geometric modulations. (2019)
2. Doludenko I. M. et al. Electrical properties arrays of intersecting of nanowires obtained in the pores of track membranes //Materials Chemistry and Physics. T. 287. – C. 126285 (2022)
3. Dryagina A., Kulesh N., Vas'kovskiy V.O. and Patrakov E. Synthesis and Magnetic Properties of Co Nanowires/PVDF Composites // IEEE Magnetics Letters. -V. 13.- pp. 1-4 (2022)

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ, ОПИСЫВАЮЩЕЙ КОНВЕКТИВНОЕ ТЕЧЕНИЕ ВЯЗКОЙ НЕСЖИМАЕМОЙ ЖИДКОСТИ В ГОРИЗОНТАЛЬНОМ СЛОЕ

Бурмашева Н.В.[1, 2], Дьячкова А.В.[1, 2], Просвиряков Е.Ю.[1, 2]
[1)] Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Российская Федерация.
[2)] Институт машиноведения Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург, Российская Федерация.
E-mail: zetsuen160@outlook.com

NUMERICAL SOLUTION OF THE BOUNDARY VALUE PROBLEM DESCRIBING THE CONVECTIVE FLOW OF A VISCOUS INCOMPRESSIBLE FLUID IN A HORIZONTAL LAYER

Burmasheva N.V.[1, 2], Dyachkova A.V.[1, 2], Prosviryakov E.Yu.[1, 2]
[1)] Ural Federal University named after the First President of Russia B. N. Yeltsin, Ekaterinburg, Russian Federation.
[2)] Institute of Engineering Science, Urals Branch, Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russian Federation.

A numerical solution of a system of differential equations describing the convective flow of a viscous incompressible fluid is presented. The solution can describe the occurrence of stagnation points. The numerical results are verified by comparing them with exact solutions.

В данной работе рассмотрена краевая задача, описывающая конвективное течение вязкой несжимаемой вертикально завихренной жидкости в горизонтальном слое. Использована математическая модель для описания движения вязких жидкостей, которая включает в себя систему уравнений тепловой конвекции [1].

Ранее были получены аналитические результаты. Система дифференциальных уравнений, отвечающая исследуемой краевой задаче, была проинтегрирована с помощью методов, описанных в [2]. На контакте жидкости с твердой поверхностью использовано условие прилипания [3]. На свободной поверхности заданы поля скорости, температуры и давления. Эти условие характеризуют ветровое воздействие на поверхность рассматриваемого в рамках задачи слоя жидкости.

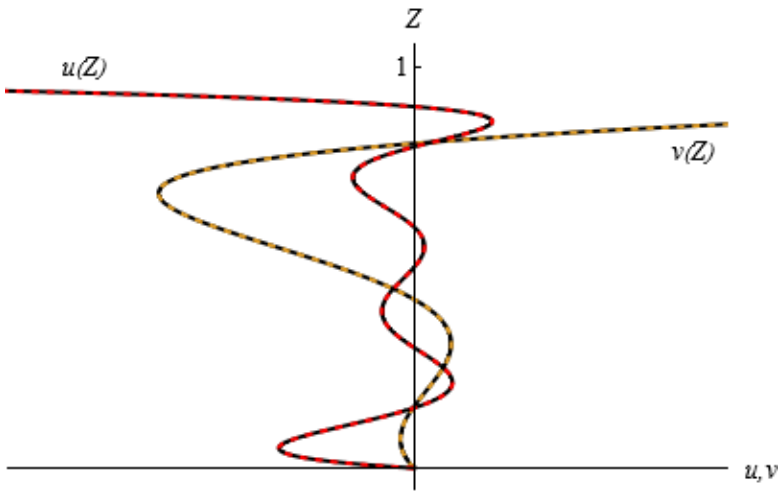


Рис. 1. Профили компонент u, v поля скорости. Непрерывная линия – аналитическое решение, пунктирная линия – численное решение.

Получено точное и построено численное решения при учете условия прилипания жидкости на нижней границе слоя. При построении численного решения краевой задачи использован метод Рунге-Кутты четвертого порядка [4]. Было показано, что в слое жидкости могут возникать области с обратным течением, причем в рассматриваемом слое может существовать не более четырех подслоев с разным направлением течения. Показано, что число застойных точек (и соответственно подслоев) может меняться в зависимости от значений параметров краевой задачи. Было проведено сравнение численного и аналитического решения поставленной задачи. Использованный численный метод оказался достаточно точным для решения исследуемой системы дифференциальных уравнений (см. рис.).

1. Гершуни Г.З., Жуховицкий Е.М. Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости. – М.: Наука, 1972. – 392 с.
2. Lin C.C. Note on a class of exact solutions in magneto-hydrodynamics // Arch. Rational Mech. Anal. – 1958. – Vol. 1. – Is. 1. – P. 391-395.
3. Goldstein S. Modern Developments in Fluid Mechanics - II. – Oxford: Oxford Univ. Press, 1938.
4. Butcher, J.C. (2008) Numerical Methods for Ordinary Differential Equations. 2nd Edition, John Wiley & Sons, Ltd., Chichester. http://dx.doi.org/10.1002/9780470753767

ТЕРМИЧЕСКИЙ РОСТ ОБЪЕМНЫХ ДОМЕНОВ, СОЗДАННЫХ ПРИ ПОМОЩИ ФЕМТОСЕКУНДНОГО ЛАЗЕРА В НИОБАТЕ ЛИТИЯ, ЛЕГИРОВАННОГО МАГНИЕМ

Ефимов А.В.[1], Кособоков М.С.[1], Лисьих Б.И.[1], Кузнецов Д.К.[1], Шур В.Я.[2]
[1)] Лаборатория передовых лазерных микро- и нанотехнологий в фотонике и биомедицине
[2)] Уральский Центр Коллективного Пользования "Современные нанотехнологии"
E-mail: artik1710@gmail.com

THERMALLY ASSISTED GROWTH OF BULK DOMAINS CREATED BY FEMTOSECOND LASER IN MAGNESIUM DOPED LITHIUM NIOBATE

Efimov A.V.[1], Kosobokov M.S.[1], Lisjikh B. I.[1], Kuznetsov D. K.[1], Shur V. Ya.[2]
[1)] Laboratory of Advanced Laser Micro- and Nanotechnologies in Photonics and Biomedicine
[2)] Ural Multiple Access Center 'Modern Nanotechnologies"

The domain growth to the polar surfaces from the tracks created by focused NIR femtosecond pulses in the bulk of MgO-doped lithium niobate plate has been studied. The tracks have been imaged by optical and Cherenkov-type second harmonic generation microscopy. The domain appearance at the irradiated

Исследуемые образцы представляли собой монодоменные пластины ниобата лития (LiNbO3), легированного магнием, толщиной 1 мм. В качестве источника излучения использовался фемтосекундный регенеративный усилитель ТЕТА-10 (Avesta, Россия) с длиной волны 1030 нм, частотой 100 кГц, длительностью импульса 240 фс и средней выходной мощностью до 10 Вт в режиме TEM00. Образец был закреплен на двухосевом моторизованном столике. Лазерное излучение фокусировалось в объеме 50-кратным объективом (NA = 0,65).

На первой стадии переключения поляризации – "создание треков" лазерное излучение фокусировалось на глубине 230 мкм ниже Z- полярной поверхности. Каждый трек был получен облучением образца последовательностью из 5000 импульсов с энергией на поверхности образца от 2.5 до 5 мкДж. Треки располагались в матрице из 5 рядов по 10 треков в каждом. Расстояние между рядами фиксированная - 50 мкм, между треками расстояние варьировалось от 10 до 30 мкм. Для получения изображения треков использовалась оптическая микроскопия (Olympus BX-61, Olympus, Япония).

На второй стадии – "рост доменов" облученный образец подвергался термическому воздействию, состоящего из цикла нагрева/охлаждения с использованием THMS600 (Linkam Scientific Instruments, Великобритания): отжиг при 250 °C в течение 10 мин, скорость нагрева 5 °C/мин, скорость охлаждения 10 °C/мин. Термическое воздействие привело к прорастанию доменов с треков до обеих полярных поверхностей.

Метод генерации второй гармоники черенковского типа (CSHG) [1], реализованный на базе Ntegra Spectra (NT-MDT, Россия), позволил получить 2D изображения треков и доменных стенок в объеме и реконструировать 3D изображения. Домены на полярных поверхностях были визуализированы с высоким пространственным разрешением методом сканирующей электронной микроскопии (SEM) (EVO LS 10, Carl Zeiss, Германия) после селективного химического травления образца в плавиковой кислоте в течение одной минуты.

Рост доменов был связан с действием пироэлектрического поля, возникающего на стадии охлаждения цикла термического воздействия [2,3,4]. Домены имели типичную для LiNbO3 гексагональную форму. Полученные результаты могут быть использованы для развития доменной инженерии.

1. S. M. Saltiel, et al., Generation of second-harmonic conical waves via nonlinear Bragg diffraction, Phys. Rev. Lett. 100, 103902 (2008). DOI: 10.1103/PhysRevLett.100.103902
2. V. Ya. Shur, et al., In situ investigation of formation of self-assembled nanodomain structure in lithium niobate after pulse laser irradiation, Appl. Phys. Lett. 99, 082901 (2011). DOI: 10.1063/1.3628646.
3. V. Ya. Shur, et al., Dimensionality increase of ferroelectric domain shape by pulse laser irradiation, Acta Mater. 219, 117270 (2021). DOI: 10.1016/j.actamat.2021.117270.
4. V. Ya. Shur, et al., Self-assembled shape evolution of the domain wall and formation of nanodomain wall traces induced by multiple IR laser pulse irradiation in lithium niobate, J. Appl. Phys. 127, 094103 (2020). DOI: 10.1063/1.5130951.

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ГЕОМЕТРИЧЕСКОЙ И ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ЭНДОЭДРАЛЬНЫХ ФУЛЛЕРЕНОВ M@C_{20} (M=Li, Na, K)

Эль Занин А. Р.[1], Борознин С. В.[1]
[1)] Волгоградский государственный университет, Волгоград, Россия
E-mail: elantony@mail.ru

THEORETICAL STUDY OF GEOMETRIC AND ELECTRONIC STRUCTURE OF ENDOHEDRAL FULLERENES M@C_{20} (M=Li, Na, K)

El Zanin A. R.[1], Boroznin S. V.[1]
[1)] Volgograd State University, Volgograd, Russia

Optimized structures of pristine C_{20}, Li@C_{20}, Na@C_{20}, K@C_{20} were obtained. The calculations were carried out within the density functional theory (DFT) method. Geometric parameters, energies of highest occupied molecular oritals (HOMO), lowest unoccupied molecular orbitals (LUMO) and HOMO-LUMO gaps.

Фуллерен C_{20} является самым маленьким представителем своего класса соединений. В литературе представлены теоретические исследования данного соединения и его эндоэдральных комплексов с щелочными металлами [1, 2, 3]. Экспериментальные исследования в данной ситуации осложнены из-за невозможности получения рассматриваемого фуллерена в достаточных количествах. Тем не менее, он был получен и идентифицирован в 2000 году [4].

В настоящей работе были изучены геометрическая и электронная структуры “чистого” C_{20} и C_{20} с внедренными атомами Li, Na, K. Расчеты производились в рамках теории функционала плотности [5].

В результате были получены оптимизированные структуры C_{20}, Li@C_{20}, Na@$_C2_0$, K@C_{20}. В качестве геометрических характеристик были выбраны средняя длина связей углерод – углерод в каркасе фуллерена и расстояние от атомов углерода каркаса фуллерена до внедренного атома. Данные величины представлены на рис. 1а. Электронная структура характеризовалась значениями энергий высшей заполненной молекулярной орбитали E_{HOMO}, низшей вакантной молекулярной орбитали E_{LUMO}, а также значением ширины запрещенной зоны

$\Delta E_g = E_{LUMO} - E_{HOMO}$.

Значения ширины запрещенной зоны приведены на рис. 1б.

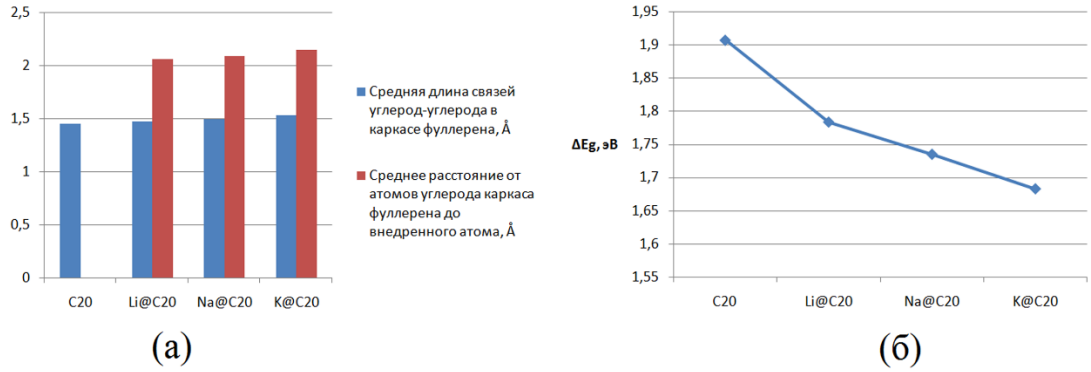


Рис. 1. Значения геометрических характеристик и ширины запрещенной зоны для C20, Li@C20, Na@C20, K@C20.

Таким образом, было показано, что средняя длина связей углерод – углерод в каркасе фуллерена, среднее расстояние от атомов углерода каркаса фуллерена до внедренного атома увеличиваются с увеличением порядкового номера элемента внедряемого атома щелочного металла. Ширина запрещенной зоны снижается с увеличением порядкового номера элемента внедряемого атома щелочного металла.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (тема "FZUU-2023-0001").

1. An Y. P. et al. First-principles study of structure and quantum transport properties of C 20 fullerene //The Journal of chemical physics. – 2009. – Т. 131. – №. 2. – С. 024311.
2. An Y. P. et al. Geometrical and Electronic Properties of the Clusters of C 20 Cage Doped with Alkali Metal Atoms //Journal of Cluster Science. – 2011. – Т. 22. – С. 31-39.
3. An Y. P. et al. Ab initio investigations of the charge transport properties of endohedral M@ C20 (M= Na and K) metallofullerenes //Chinese Physics B. – 2010. – Т. 19. – №. 11. – С. 113402.
4. Prinzbach H. et al. Gas-phase production and photoelectron spectroscopy of the smallest fullerene, C20 //Nature. – 2000. – Т. 407. – №. 6800. – С. 60-63.
5. Сатанин, А. М. Введение в теорию функционала плотности: учебно-методическое пособие / А. М. Сатанин. — Нижний Новгород: ННГУ им. Н. И. Лобачевского, 2009. — 64 с.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МОДИФИЦИРОВАННЫХ НИТРОГРУППОЙ БОРОНИТРИДНЫХ НАНОТРУБОК В КАЧЕСТВЕ ЭЛЕМЕНТОВ СЕНСОРНЫХ УСТРОЙСТВ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ МИКРОКОЛИЧЕСТВА ВЕЩЕСТВА

Ерофеев Д.Р.[1], Борознина Н.П.[1], Борознин С.В.[1], Запороцкова И.В.[1]
[1)] Волгоградский государственный университет, Волгоград, Россия
E-mail: NMTb-191_127925@volsu.ru

THE USE OF BORONITRIDE NANOTUBES MODIFIED BY THE NITRO GROUP AS ELEMENTS OF SENSOR DEVICES FOR DETERMINING THE MICRO-QUANTITY OF A SUBSTANCE

Erofeev D.R.[1], Boroznina N.P.[1], Boroznin S.V.[1], Zaporotskova I.V.[1]
[1)] Volgograd State University, Volgograd, Russia

In this paper, the possibility of using modified boronitride nanotubes as elements of sensor devices that exhibit sensitivity to gas-phase carbon compounds is considered.

В настоящее время загрязнение окружающей среды и, как следствие, ухудшение экологии, является одной из важнейших проблем человечества, поскольку негативно влияет на жизнь человека в целом и является одним из факторов развития серьезных заболеваний. Ученые по всему миру занимающиеся исследованиями в области био- и нанотехнологий [1,2]. На протяжении многих лет группа ученых занимается определением сорбционной и сенсорной активности модифицированных углеродных и бороуглеродных нанотрубок, результаты которых дали предпосылки для проведения подобных исследований в отношении боронитридных наноструктур [3]. Также были изучены их ярко выраженные уникальные физические, химические, электрические и механические свойства, позволяющие ускорить разрешения вопросов улучшения экологии и здоровья человека. Данные исследования позволят проводить дагностику заболеваний человека и определение основных маркеров заболеваний (к примеру таких как сахарный диабет) на ранних стадиях.

Для определения маркеров заболеваний в выдыхамом человеком воздухе возможно использование высокочувствительных сенсорных датчиков. Для этого лучше всего использовать материал, способный идентифицировать ультрамалое количество вещества. Для этой цели были специально выбраны модифицированные нитрогруппой ($–NO_2$) боронитридные нанотрубки (BNNTs). Для подтверждения эффективности выбранных наносистем были проведены исследования для определения сорбционной и сенсорной активности наносистемы $BNNT–NO_2$ в отношении молекул ацетона. С помощью компьютерного моделирования получилось установить значение энергии взаимодействия при которой система находится в наиболее стабильном

состоянии. Далее был смоделирован процесс сканирования воображаемой поверхности на которой присутствовала анализируемая молекула. В результате было установлено слабое Ван-Дер-Ваальсово взаимодействие, наличие которого говорит о возможности многократного использования сенсорного устройства на основе исследуемого нанокомплекса без разрушения и химического загрязнения. Таким образом, использование устройств на основе данной технологии может являться решением проблемы определения ультрамалого количества вещества в медицинских целях.

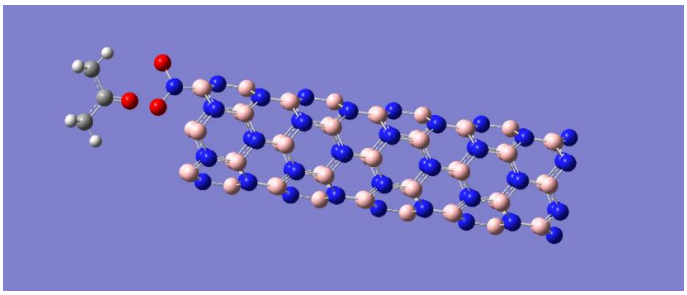


Рис. 1. Модель взаимодействия модифицированной нитрогруппой БННТ с молекулой ацетона

На основании проведенных модельных исследований было доказано наличие сорбционного и сенсорного взаимодействия между гранично модифицированной боронитридной нанотрубкой и молекулой ацетона. Полученные значения энергий взаимодействия позволяют говорить о селективности системы и, следовательно, способности сенсорного устройства идентифицировать различные соединения и субстанции, например, определять вредные соединения в воздухе, а также диагностировать заболевание на ранней стадии.

1. Thundat, T., Oden, P.I., and Warmack, R.J., Nanoscale and Microscale Thermophysical Engineering, vol 1, pp. 185—199, (1997)
2. Ilic, B., Czaplewski, D., Craighead, H.G., Neuzil, P., Campagnolo, C., and Batt, C., Appiled Physics Letters, vol. 77, p. 450, (2000)
3. Zaporotskova, I.V., Boroznina, N.P., and Boroznin, S.V., Smart Innovation, Systems and Technologies, vol. 287, pp. 137—149, (2022)

ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРО- И МАГНИТОТРАНСПОРТА В ТОПОЛОГИЧЕСКОМ ПОЛУМЕТАЛЛЕ $PtSn_4$

Фоминых Б.М.[1, 2], Перевалова А.Н.[2], Наумов С.В.[2], Марченков В.В.[1, 2]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
[2)] Институт физики металлов имени М. Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
E-mail: fominykh@imp.uran.ru

FEATURES OF THE ELECTRO- AND MAGNETOTRANSPORT IN TOPOLOGICAL SEMIMETAL $PtSn_4$

Fominykh B.M.[1, 2], Perevalova A.N.[2], Naumov S.V.[2], Marchenkov V.V.[1, 2]
[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin, Ekaterinburg, Russia
[2)] M. N. Mikheev Institute of Metal Physics, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russia

$PtSn_4$ single crystals were fabricated by the method of crystallization from a solution in a melt. The electrical resistance of a single crystal of the topological Dirac node arc semimetal $PtSn_4$ were investigated.

В настоящее время одной из актуальных проблем физики конденсированного состояния является поиск и исследование новых топологических полуметаллов. Одним из таких материалов является $PtSn_4$ – новый тип топологических полуметаллов, в котором точки Дирака образуют дуги в импульсном пространстве [1]. Особенности электронной структуры топологических материалов могут приводить ко многим необычным электронным транспортным свойствам, таким как большое магнитосопротивление, отрицательное продольное магнитосопротивление, высокая подвижность носителей заряда и др.

Монокристаллы $PtSn_4$ были получены методом из раствора в расплаве. Химический состав образцов был исследован методом рентгеновского энергодисперсионного микроанализа на сканирующем электронном микроскопе Quanta 200 Pegasus с приставкой EDAX в Центре коллективного пользования (ЦКП) «Испытательный центр нанотехнологий и перспективных материалов» ИФМ УрО РАН. Установлено, что химический состав исследуемого кристалла соответствует стехиометрическому $PtSn_4$. Рентгеноструктурный анализ показал, что полученные монокристаллы имеют орторомбическую структуру с пространственной группой Ссса и параметрами решетки: a≈6.31 Å, b≈11.33 Å, c≈6.27 Å. Измерение сопротивления было проведено с использованием четырехконтактной методики при температурах от 4.2 до 300 K в магнитных полях до 90 кЭ.

В результате измерения электросопротивления монокристалла $PtSn_4$ было установлено, что электросопротивление зависит от температуры по

квадратичному закону при низких температурах. На температурной зависимости сопротивления в магнитном поле было обнаружено наличие минимума. Подобный характер зависимости сопротивления в магнитном поле наблюдался, например, в монокристалле WTe_2 [2] и может быть объяснен переходом от эффективно сильных ($\omega_c\tau \gg 1$, где ω_c – циклотронная частота, τ – время релаксации носителей тока) к эффективно слабым ($\omega_c\tau \ll 1$) магнитным полям. Помимо этого, была оценена длина свободного пробега носителей тока в $PtSn_4$ в области промежуточных магнитных полей ($\omega_c\tau \sim 1$).

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема "Спин", № 122021000036-3).

1. Wu Y., Wang LL., Mun E. et al. Nature Phys 12, 667–671 (2016)
2. Перевалова А. Н. и др. Физика металлов и металловедение 123, 1131-1137 (2022)

СПЕЦИФИКА РАССЕЯНИЯ УЛЬТРАКОРОТКИХ ИМПУЛЬСОВ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА АЛМАЗАХ С NV-ЦЕНТРАМИ

Герасименко Д.Е.[1], Макаров Д.Н.[1]
[1)] Северный (Арктический) федеральный университет имени М.В. Ломоносова г. Архангельск, Россия
E-mail: gerasimenko.d@edu.narfu.ru

SPECIFICS OF SCATTERING OF ULTRASHORT X-RAY PULSES ON DIAMONDS WITH NV CENTERS

Gerasimenko D.E.[1], Makarov D.N.[1]
[1)] Northern Arctic Federal University named after M.V. Lomonosov, Arkhangelsk, Russia

X-ray diffraction analysis of a substance using ultrashort pulses (USPs) makes it possible to study complex structures of a substance with high spatial and temporal resolution. Substances with a complex structure can include such a diamond defect as the NV center. [1,2]

Данные дефекты в алмазе могут быть сосредоточены как в одном месте, так и разбросаны по всей кристаллической решетке, что заранее не является нам известным [3,4]. В настоящее время большое внимание уделяется одиночным NV – центрам, либо небольшому их скоплению, а также их ориентации в алмазе. При исследовании структуры алмаза с NV центрами с использованием УКИ, большое значение на результат оказывает время взаимодействия импульса с изучаемой системой [5]. Это объясняется тем, что часть атомов в веществе, которая попадает в пространственную область размера ультракороткого импульса, излучает когерентно.

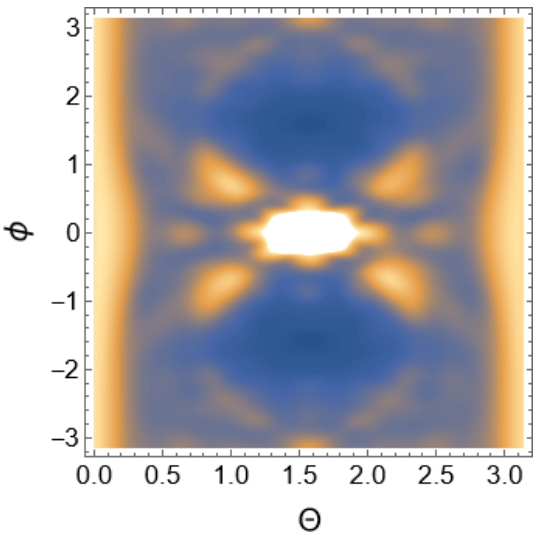


Рис. 1. Спектр рассеяния на структуре алмаза полученный с помощью формулы

Для избегания всех погрешностей и получения наиболее точных результатов нами была разработана теория, которая учитывает множество факторов, таких как время взаимодействия импульса, его длины и др., нами было использовано уравнение для многоциклового импульса, полученное в работе [4], которое наиболее точно демонстрирует спектры рассеяния (рис. 1)

Исследование поддержано госзаданием РФ № FSRU-2021-0008.

1. Jones, N. Crystallography: Atomic secrets. 505, 602–603. (2018)
2. Benediktovich, A.; Feranchuk, I.; Ulyanenkov, A. Theoretical Concepts of X-Ray Nanoscale Analysis; Springer: Berlin/Heidelberg, Germany, (2014).
3. Eseev, M.K.; Matveev, V.I.; Makarov, D.N. Diagnostics of Nanosystems with the Use of Ultrashort X-Ray Pulses: Theory and Experiment (Brief Review). JETP Lett. 114, 387–405. (2021)
4. Eseev, M.; Makarova, K.; Makarov, D. Scattering of Ultrashort X-ray Pulses on Diamonds with NV Centers. 12, 1417. (2022)
5. Maroju, P.K.; Grazioli, C.; Di Fraia, M.; Moioli, M.; Ertel, D.; Ahmadi, H.; Plekan, O.; Finetti, P.; Allaria, E.; Giannessi, L.; et al. Attosecond pulse shaping using a seeded free-electron laser. 578, 386–391. (2020)

ЭВОЛЮЦИЯ АНСАМБЛЯ СФЕРИЧЕСКИХ ЧАСТИЦ В МЕТАСТАБИЛЬНОЙ СРЕДЕ С УЧЕТОМ ИХ СКОРОСТИ РОСТА В НЕСТАЦИОНАРНОМ СОСТОЯНИИ

Глебова А.Е.[1], Корозникова И.Е.[1], Александров Д.В.[1, 2]
[1)] Лаборатория стохастического транспорта наночастиц в живом организме, Лаборатория многомасштабного математического моделирования, Уральский Федеральный Университет, Ленина 51, Екатеринбург, 620000, Российская Федерация
[2)] Департамент теоретической и математической физики, Уральский Федеральный Университет, Ленина 51, Екатеринбург, 620000, Российская Федерация
E-mail: alexandra.e.glebova@gmail.com

EVOLUTION OF AN ENSEMBLE OF SPHERICAL PARTICLES IN METASTABLE MEDIA WITH ALLOWANCE FOR THEIR UNSTEADY-STATE GROWTH RATES

Glebova A.E.[1], Koroznikova I.E.[1], Alexandrov D.V.[1, 2]
[1)] Laboratory of Stochastic Transport of Nanoparticles in Living Systems, Laboratory of Multi-Scale Mathematical Modeling, Ural Federal University, Lenin ave., 51, Ekaterinburg, 620000, Russian Federation
[2)] Department of Theoretical and Mathematical Physics, Ural Federal University, Lenin ave., 51, Ekaterinburg, 620000, Russian Federation

The process of particle nucleation and growth at the initial and intermediate stages of bulk crystallization in metastable liquids is studied. An integrodifferential model of balance and kinetic equations with corresponding boundary and initial conditions is formulated with allowance.

В данном исследовании мы построили математическую модель эволюции полидисперсного кристаллического ансамбля с нестационарной скоростью роста каждого сферического ядра [1]. Теория учитывает нестационарность теплового/концентрационного поля вокруг растущего сферического кристалла [2]. Эффект нестационарности входит в выражение для скорости роста сферического кристалла и существенно влияет на динамику ансамбля кристаллов в метастабильной жидкости. Метод седловой точки был использован для решения интегро-дифференциальной модели кинетических и балансовых уравнений с соответствующими граничными условиями. Этот метод позволил получить полное аналитическое решение задачи в параметрической форме (функция распределения частиц по радиусу, переохлаждение/супернасыщение жидкости, общее число частиц в жидкости и их средний размер). Наши расчеты показывают, что первые четыре приближения метода седловой точки дают сходящееся решение для кинетики нуклеации WVFZ и Meirs. Функция распределения увеличивается до максимального размера кристаллов и смещается в сторону больших радиусов с увеличением времени.

Нестационарность роста отдельных ядер существенно влияет на динамическое поведение ансамбля кристаллов.

Довольно часто зарождение и рост кристаллов сопровождается направленным фазовым превращением вдоль выбранного пространственного направления. Движущей силой направленного движения является градиент температуры и/или концентрации. В таких процессах, зарождение и рост кристаллов могут происходить в двухфазном слое, заполненном дендритоподобными структурами. Поэтому имеет смысл распространить настоящую теорию на такие более сложные системы с подвижными границами области кристаллизации. Это представляет собой важное направление для будущих исследований, которое должно быть развито путем обобщения настоящей теории и теории двухфазного слоя.

1. D.V. Alexandrov, A.P. Malygin, J. Phys. A Math. Theor. 46, 455101 (2013)
2. I.V. Alexandrova, A.A. Ivanov, A.P. Malygin, D.V. Alexandrov, M.A. Nikishina, Eur. Phys. J. Spec. Top. 231, 1089 (2022)

ВЛИЯНИЕ СОСТАВОВ ЛЕГКОПЛАВКОЙ ДОБАВКИ НА МАГНИТНЫЕ ГИСТЕРЕЗИСНЫЕ СВОЙСТВА НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СПЛАВОВ Nd-Fe-B ПОСЛЕ ИНФИЛЬТРАЦИИ

Голубятникова А. А.[1], Шалагинов А. Н.[1], Андреев С. В.[1], Волегов А. С.[1]
[1)] Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия
E-mail: a.a.golubiatnikova@urfu.me

INFLUENCE OF THE COMPOSITION OF A LOW-MELTING ADDITIVE ON THE MAGNETIC HYSTERESIS PROPERTIES OF Nd-Fe-B NANOCRYSTALLINE ALLOYS AFTER INFILTRATION

Golubiatnikova A. A.[1], Shalaginov A. N.[1], Andreev S. V.[1], Volegov A. S.[1]
[1)] Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia

In this work the influence of infiltration of low-melting additives on the magnetic hysteresis properties of a nanocrystalline alloy based of the compound Nd-Fe-B was investigated. It was found that additives R-Cu-Co (R = Gd, Ce, and La) lead to an increase in the coercivity from 30% to 40%.

Среди разнообразных магнитных материалов особое значение имеют магнитотвердые материалы. Изготовленные из них постоянные магниты нашли широкое применение во всех областях науки и техники. Одним из основных материалов для производства постоянных магнитов является соединение Nd-Fe-B. Неодимовые магниты обладают выдающимися магнитными свойствами и применяются во многих устройствах, в том числе в экологически чистых источниках энергии (электромобили, ветровые турбины). Недостатком магнитов на основе Nd-Fe-B является относительно низкая температура Кюри фазы $Nd_2Fe_{14}B$ - 312 °C, что приводит к невозможности их использования в сильных размагничивающих полях при повышенной рабочей температуре.

В данной работе исследован способ повышения коэрцитивной силы магнитотвердого сплава на основе соединения $Nd_2Fe_{14}B$ путем инфильтрации легкоплавких добавок. Методом дуговой плавки получены легкоплавкие добавки следующего состава: Gd-Cu-Co, Ce-Cu-Co и La-Cu-Co.

Добавки с Gd, La, и Ce выбраны с целью установления, влияния их состава на межзеренное обменное взаимодействие и магнитные гистерезисные свойства исходного сплава. Из-за низкого поля анизотропии данных редкоземельных металлов H_c должна уменьшаться. Но в работе [1] было показано, что при добавлении Gd к $Nd_2Fe_{14}B$, из-за появления фазы $GdFe_2$ на границе раздела с магнитотвердым слоем, наблюдалось увеличение коэрцитивной силы. Это объясняется тем, что намагниченность в $GdFe_2$ антипараллельна намагниченности в $Nd_2Fe_{14}B$.

Основным материалом для эксперимента стал сплав марки MQP-B. Он представляет собой быстрозакаленный сплав Nd-Fe-B. Сплав MQP-B размалывался в 95% этиловом спирте в шаровой мельнице в течение 5 мин без добавки, а затем совместно с легкоплавкой добавкой на протяжении 5 мин. Пропорции по массе 20:80. Готовые смеси были спрессованы в параллелепипеды и подготовлены к отжигу в вакууме. Выбран интервал температур 600-750°C. Время отжига – 1 час. Предельные петли магнитного гистерезиса отожженных образцов измерялись посредством вибрационного магнитометра КВАНС 1.

H_c исходного сплава марки MQP-B ≈ 10 кЭ. Полученные значение коэрцитивной силы составили:

Gd-Cu-Co – от 8,6 до 14,1 кЭ

Ce-Cu-Co – от 10,8 до 13,5 кЭ

La-Cu-Co – от 10,3 до 12,9 кЭ

Наибольшие значения H_c наблюдаются при следующих условиях отжига: температура отжига T = 700 °C, добавка Gd-Cu-Co.

Полученные результаты показывают способ повышения H_c постоянных магнитов с использованием наиболее дешевых редкоземельных металлов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 21-72-10104)

1. Akdogan O. et al. Superferrimagnetism in hard Nd-Fe-B thick films, an original concept for coercivity enhancement //Journal of Applied Physics. (2014) Т. 115. – №. 17. – С. 17A764.

МАГНИТНЫЕ И ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА, СТРУКТУРА И ТВЕРДОСТЬ ОБРАЗЦОВ ИЗ КОРРОЗИОННО-СТОЙКОЙ СТАЛИ GP1, ИЗГОТОВЛЕННЫХ НА ЛАЗЕРНОМ 3D-ПРИНТЕРЕ

Гордеев Н.В.[1, 2], Сташков А.Н.[2], Щапова Е.А.[2]
[1)] Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: Gordeev.Nikita@urfu.me

MAGNETIC AND ELECTRICAL PROPERTIES, STRUCTURE AND HARDNESS OF GP1 STAINLESS-STEEL SAMPLES MANUFACTURED ON A LASER 3D PRINTER

Gordeev N.V.[1, 2], Stashkov A.N.[2], Schapova E.A.[2]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia
[2)] M.N. Mikheev lnstitute of Metal Physics of Ural Branch of Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia

This work was devoted to an experimental study of the magnetic and electrical properties, hardness and structure of GP1 steel samples made by selective laser melting, before and after heat treatment.

Аддитивные технологии (АТ) позволяют значительно сократить затраты на производство сложных деталей. При использовании АТ снижается количество требуемого материала и сокращается энергоемкость производства. На данный момент существует множество способов получения изделий аддитивными технологиями. Один из них - метод селективного лазерного сплавления (СЛС) для печати металлами. Технология СЛС используется для получения деталей различной формы, которые как правило не подвергаются дальнейшей механической обработке. Сталь GP1 (аналог мартенситно-стареющей стали 17-4 PH) может применяется в различных отраслях, где требуется коррозионная стойкость и прочность изделий. Термическая обработка стали GP1 позволяет достичь требуемых механических свойств после изготовления детали на лазерном 3D-принтере. Целью данной работы является экспериментальное изучение магнитных и электрических свойств, твердости и структуры образцов из стали GP1, изготовленных методом селективного лазерного сплавления, до и после термообработок.

Исследования были проведены на образцах из стали GP1 (15-17.5% Cr, 3-5% Ni, 3-5% Cu, ≤1% Mn, ≤1% Si, ≤0.5% Mo, 0.15-0.45% Nb, ≤0.07% C). Изготовление образцов осуществлялось с помощью технологии СЛС, при этом использовался порошок с размером порошинок от 10 до 40 мкм. После изготовления образцы проходили отжиг при 1050 ºС в течение 30 минут, а некоторые из них также подвергались старению при 650 ºС в течение 4 часов.

Магнитные свойства были измерены с помощью магнитометрической установки Remagraph C-500 и вибрационного магнитометра Lake Shore Cryotronics VSM 7407. Удельное электрическое сопротивление измерялось по четырехконтактной схеме. Твердость измерялась по методу Роквелла при нагрузке 1471,5 Н. С помощью оптического микроскопа Olympus gx51 исследовалась структура микрошлифов.

Установлено, что образцы без термообработки (ТО) и с двойной ТО (высокотемпературный отжиг и старение) обладают анизотропией магнитных свойств. После проведения отжига образец становится более однородным по магнитным свойствам. Удельное электрическое сопротивление и твердость образца с двойной термообработкой меньше, нежели у образцов без ТО и с отжигом, что противоречит данным работы [1]. В структуре образца, не проходившего ТО, наблюдаться отчетливые бассейны расплава, которые полностью пропадают после двойной ТО.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «Диагностика», №122021000030-1).

1. Hu Z., Zhu H., Zhang H., Zeng X.,Optics & Laser Technology, № 87, c.17-25 (2017)

ПРОВЕДЕНИЕ ИЗМЕРЕНИЙ МАГНИТНЫХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ ПЕРВОГО РОДА В УСЛОВИЯХ ГИДРОСТАТИЧЕСКОГО ДАВЛЕНИЯ

Говорина В.В.[1], Незнахин Д.С.[1]
[1)] Институт естественных наук и математики, Уральский федерльный университет, Екатеринбург, Россия
E-mail: Valeria.Govorina@urfu.me

FIRST-ORDER MAGNETIC PHASE TRANSITIONS AT HYDROSTATIC PRESSURE

Govorina V.V.[1], Neznakhin D.S.[1]
[1)] Institute of Natural Sciences and Mathematics, Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia

We studied the effect of hydrostatic pressure on the magnetic properties of the MnAs single crystal in which a first-order phase transition is observed. In this work, we developed a method for obtaining correct results in magnetic measurements.

Магнитные фазовые переходы первого рода очень чувствительны к внешним воздействиям (температура, давление, внешнее магнитное поле). Так, например, в соединении MnAs при атмосферном давлении наблюдается магнитоструктурный фазовый переход 1 рода в области комнатных температур, однако при приложении гидростатического давления температура перехода снижается [1]; помимо этого, наблюдаются изменения изотермического изменения магнитной энтропии – количественной характеристики магнитокалорического эффекта (МКЭ) [2]. В работе [2] исследования выполнены на поликристаллическом образце MnAs. Однако в монокристаллических образцах при атмосферном давлении наблюдается анизотропия изотермического изменения магнитной энтропии [3]. В связи с этим интерес представляет поведение монокристаллических образцов, а именно их кривые намагничивания вдоль разных кристаллографических осей, температуры фазового перехода 1 рода как при нагревании, так и при охлаждении и количественные характеристики МКЭ в условиях гидростатического давления.

В настоящей работе разработана методика проведения измерений магнитных фазовых переходов первого рода в условиях гидростатического давления. Для создания давления использовалась ячейка давления Easy Lab 10, которая способна создавать гидростатическое давление до 10 кбар, действующее на образец. Магнитные свойства образца, находящегося в ячейке, измерялись на установке MPMS-XL в полях с напряженностью до 70 кЭ. В работе уделено внимание методике определения давления внутри ячейки с использованием оловянного манометра, учитывающей магнитную предысторию образца,

наличие вмороженного магнитного поля от соленоида. Подобраны скорости изменения температуры: достаточно малой для установления теплового равновесия в ячейке и достаточно большой из практических соображений. Проведено сравнение результатов измерений, полученных в различных режимах установления магнитных полей. Разработанная методика может быть использована для проведения измерений магнитных фазовых переходов первого рода в условиях гидростатического давления для многих ферромагнитных материалов.

1. Menyuk N., Kafalas J. A., Dwight K., and Goodenough J.B., Phys. Rev., 177, 942, 1969
2. Gama S., Coelho A.A. et. al, Phys. Rev. Lett., 93, 237202, 2004
3. Говорина В.В., Амиров А.А., Сташкова Л.А., Незнахин Д.С., СПФКС-22, Тезисы докладов, 93, 2022

ДОМЕННЫЙ МЕХАНИЗМ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОТЕРЬ В КРИСТАЛЛЕ СЕГНЕТОВОЙ СОЛИ

Гупалова А.Е.[1], Попов И.И.[1]
[1)] Воронежский государственный технический университет, г. Воронеж, Россия
E-mail: gupalova03@bk.ru

DOMAIN MECHANISM OF DIELECTRIC LOSSES IN A ROCHELLE SALT CRYSTAL

Gupalova A.E.[1], Popov I.I.[1]
[1)] Voronezh State Technical University, Voronezh, Russia

The dependences of the dielectric loss tgδ on the intensity of the alternating electric field E in a Rochelle salt single crystal were investigated. Changes in the tgδ(E) at different temperatures are associated with the coercive field decrease as it approaches the phase transition temperature.

Объектом исследования являлся кристалл сегнетовой соли $KNaC_4H_4O_6 \cdot 4H_2O$, который обладает двумя точками фазового перехода (–18 и +24 °C). Вне точек Кюри этот кристалл имеет ромбическую симметрию (точечная группа 222), в сегнетофазе становится моноклинным (точечная группа 2) с единственным элементом симметрии – осью второго порядка [1]. Целью данной работы являлось изучение механизма диэлектрических потерь под действием переменного электрического поля разной напряженности в области верхней точки Кюри. Образец сегнетовой соли X-среза имел форму прямоугольной пластины с геометрическими размерами 0,5 × 5 × 7 мм^3, на наибольшие поверхности которого были нанесены электроды из сусального серебра. Измерение тангенса угла диэлектрических потерь проводилось с помощью моста TESLA BM-400G на частоте 1 кГц при напряженностях переменного электрического поля от 20 до 600 В/см.

Измерения показали, что в сегнетоэлектрической фазе на зависимостях тангенса угла диэлектрических потерь tgδ от напряженности переменного электрического поля E наблюдается пик (рис. 1).

Отметим, что при приближении к температуре Кюри пик на зависимостях tgδ(E) возрастает и смещается в сторону меньших значений E. Предполагается, что такое поведение зависимостей tgδ(E) обусловлено доменным механизмом [2] и связано с уменьшением величины коэрцитивного поля E_C при увеличении температуры. В пользу данного предположения свидетельствует отсутствие пика на зависимости tgδ(E) в параэлектрической фазе (рис. 1, кривая 1).

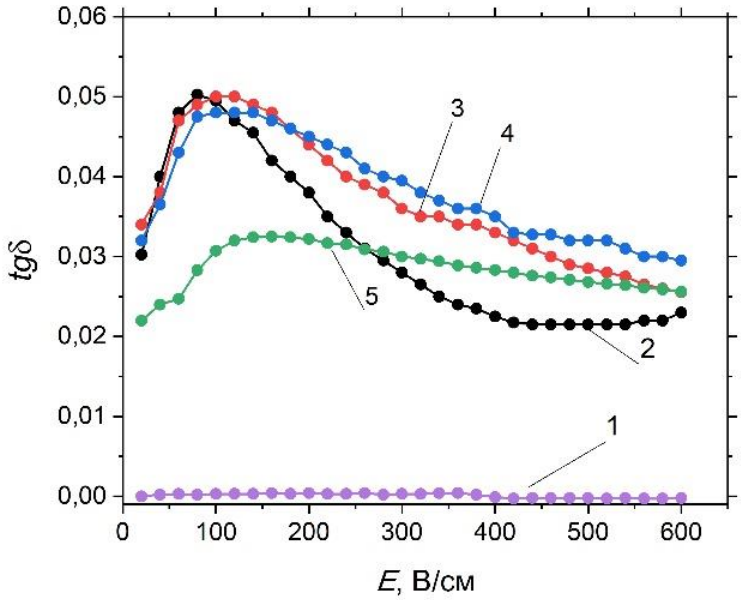


Рис. 1. Зависимости тангенса угла диэлектрических потерь кристалла сегнетовой соли от напряженности переменного поля, измеренные на частоте 1 кГц при разных значениях температур, °С: 1–30,2; 2–23,1; 3 – 22,1; 4 – 21,1; 5 – 19,1

1. Гриднев С.А. Основы физики полярных диэлектриков / С. А. Гриднев. – Саарбрюккен: Palmarium Academic Publishing, 2014. – 219 с.
2. Гриднев С.А., Даринский Б.М., Попов В.М., Шувалов Л.А. Амплитудные зависимости диэлектрических потерь в реальных кристаллах ТГС // ФТТ, 1986, т. 28, № 7, с. 2009-2014.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И ФИЗИКОХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СПЛАВОВ Al-Cu С ПОМОЩЬЮ МЕЖЧАСТИЧНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ НА ОСНОВЕ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

Хазиева Е.О.[1, 2], Рыльцев Р.Е.[1, 2], Щелкачев Н.М.[3], Типеев А.О.[2]
[1)] Уральский Федеральный Университет имени первого президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
[2)] Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[3)] Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН, Москва, Россия
E-mail: cat.hazieva@yandex.ru

COMPUTER MODELING OF THE STRUCTURE AND PHYSICOCHEMICAL PROPERTIES OF Al-Cu ALLOYS USING INTERPARTICLE POTENTIALS BASED ON NEURAL NETWORKS

Hazieva E.O.[1, 2], Ryltsev R.E.[1, 2], Chtchelkatchev N.M.[3], Tipeev A.O.[2]
[1)] The Ural Federal University named after the first President of Russia B. N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia
[2)] Institute of Metallurgy of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia
[3)] L. F. Vereshchagin Institute of High Pressure Physics of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

We show that DP reproduces very well ab initio data for energies, forces and virials, as well as radial distribution functions and velocity autocorrelation functions extracted from AIMD. The experimental data are generally in good agreement with the experiment.

В последние несколько лет достигнут революционный прогресс в построении классических межатомных потенциалов взаимодействия методами машинного обучения [1-4]. Основная идея такого подхода – аппроксимировать поверхность потенциальной энергии системы с помощью некоторой многочастичной функции общего вида (например, многослойной нейронной сети) используя эталонные значения, полученные с помощью ab initio расчетов. Классическая молекулярная динамика с такими потенциалами позволяет получить результаты, сравнимые по точности с ab initio методами при на 3–4 порядка меньших вычислительных затратах. Тем не менее, многие важные вопросы, связанные с методами обучения и использования таких потенциалов до сих пор не решены.

Мы рассматриваем бинарные сплавы Al-Cu, которые являются интересными модельными системами для изучения возможностей потенциалов машинного обучения. Во-первых, они представляют собой смеси металлов с различными электронными конфигурациями: p-металл (Al) и благородный s-металл (Cu), и потому демонстрируют сложное химическое взаимодействие между компонентами, которое вызывает нетривиальное поведение. Например, в данной

системе образуется ряд сложных интерметаллических фаз и наблюдается немонотонное поведение физико-химических свойств расплавов при изменении состава. Во-вторых, как сами бинарные сплавы Al-Cu, так и соответствующие чистые компоненты Al, Cu, представляют самостоятельный фундаментальный интерес (как модельные системы) и большое практическое значение.

Для разработки потенциалов глубокого обучения (DP – Deep Potentials) для расплавов Al-Cu мы используем пакет DeePMD-kit [5], в котором в качестве регрессионной модели используется многослойные нейронные сети прямого распространения. С помощью потенциала, натренированного на разных конфигурациях, были проверены ряд свойств расплавов Al-Cu. Мы показываем, что DP очень хорошо воспроизводит ab initio данные для энергий, сил и вириалов, а также функции радиального распределения и функции автокорреляции скорости, извлеченные из AIMD. Экспериментальные данные для плотности и структурных характеристик расплавов также воспроизводятся с хорошей точностью. Так же были смоделированы фазовые превращения, как чистого компонента Al, так и одного из интерметалидов, результаты которых находятся в хорошем согласии с экспериментом. Проведены предварительные тесты для оценки возможности моделирования нуклеации в переохлажденных жидкостях, количественного расчета транспортных свойств и описания пластических деформаций.

Исследование выполнено при поддержке гранта РНФ (№ 22-22-00506)

1. A. Singraber et al. Theory Comput., 15, 1827 (2019)
2. L. Zhang, J. Han, H. Wang, R. Car, W. E, Phys. Rev. Lett. 120, 143001 (2018)
3. L. Zhang, D.-Y. Lin, H. Wang, R. Car, W. E, Phys. Rev. Materials 3, 023804 (2019)
4. F. Karsai, G. Kresse, M. Bokdam, Phys. Rev. Lett. 122, 225701, (2019)
5. Wen, T. et al. Deep potentials for materials science. Materials Futures, 1, 022601, (2022)

EVOLUTION OF THE MAGNETIC PROPERTIES OF TWO-DIMENSIONAL Fe_3GeTe_2 UNDER STRAIN

Iakovlev I.A.[1], Pushkarev G.V.[1], Mazurenko V.V.[1]
[1)] Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia
E-mail: iakovlev.ilia@mail.ru

In this work we study the evolution of magnetic properties, magnetization, and magnon spectra of Fe_3GeTe_2 changes under in-plane biaxial strain. We found that moderate tensile strain significantly increases Curie temperature, while compressive one destroys FM order.

The Fe_3GeTe_2 monolayer is one of the striking examples of two-dimensional van der Waals systems, where the long-range magnetic order can be explained by the presence of anisotropy in the system [1]. However, practical use of two-dimensional magnets is impossible without a substrate, which induces the lattice deformation and thus may lead to significant changes in magnetic properties, including the value of Curie temperature [2].

Using the density functional theory (DFT) implemented in the Vienna ab initio simulation package (VASP) [3], we evaluated the exchange integrals in the system under consideration at moderate strains in the framework of the Heisenberg model. Based on the results of Monte Carlo simulations carried out in the UppASD package [4] we conclude that a 3% tensile strain leads to a significant increase in the Curie temperature by about 40% of the initial value. It happens because of the sign change of the long-range exchange parameters from AFM to FM. In turn, a moderate compressive strain leads to the complete destabilization of the ferromagnetic ground state due to the enhanced magnetic frustration effect. The obtained results were confirmed by analyzing the adiabatic magnon spectra behavior in the framework of the random phase approximation. The acoustic mode becomes negative as the lattice parameter decreases by 3%, which indicates the instability of the ferromagnetic order.

This work was supported by the Russian Science Foundation Grant 21-72-10136.

1. Deng Y., Yu Y., Song Y. et al., Nature, 563, 94–99, (2018).
2. Liu N., Zhou S., Zhao J., s, Phys. Rev. Materials, 4, 094003, (2020).
3. Kresse G., Furthm¨uller J., Physical Review B, 54, 11169, (1996).
4. Eriksson O., Bergman A., Bergqvist L., Hellsvik J., Atomistic Spin Dynamics: Foundations and Applications, Oxford University Press, Oxford (2017).

ИССЛЕДОВАНИЕ ДОЗОВОЙ ЗАВИСИМОСТИ ДЕТЕКТОРОВ НА ОСНОВЕ Al_2O_3

Игумнова Д.И.[1], Смольникова Е.Н.[1], Войнов В.С.[1], Мильман И.И.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: dasha_igumnova@bk.ru

INVESTIGATION OF THE DOSE DEPENDENCE OF DETECTORS BASED ON Al_2O_3

Igumnova D.I.[1], Smolnikova E.N.[1], Voynov V. S.[1], Milman I. I.[1]
[1)] Ural Federal University named after the first president of Russia B.N. Eltsin, Yekaterinburg, Russia

Thermostimulated luminescence occurs when a solid is heated, which is previously irradiated by ionizing radiation. Dose limit is proportional to the maximum number of electrons captured by detector traps. Thermooptical processing allows to change concentration of oxygen vacancies.

В последние годы метод термолюминесцентной дозиметрии получил широкое применение в мировой практике индивидуального дозиметрического контроля. Термолюминесцентные детекторы (ТЛД) являются самым современным и наиболее распространенным типом индивидуальных дозиметров.

Люминесценция (от латинского lumen — свет и escent — суффикс, означающий слабое действие) — это неравновесное излучение, представляющее собой избыток над тепловым излучением тела и продолжающееся в течение времени, значительно превышающего период световых колебаний Термостимулированная люминесценция возникает при нагреве твердого тела, предварительно облученного ионизирующим излучением.

Целью работы является исследование возможных способов увеличения чувствительности и диапазона работы для детекторов Al_2O_3.

ТЛД являются твердотельными детекторами, значит при изучении ТЛ процессов пользуются зонной энергетической моделью кристалла [2].

Установлено, что под действием ионизирующего излучения электроны из валентной зоны переходят в зону проводимости и теряют связь с тем дефектом, которому они принадлежали ранее, то есть становится зонным и перемещается по кристаллу до тех пор, пока не встретит какой-либо новый дефект примесной решетки, называемый ловушкой. Ловушки создаются за счет введения специальных донорных, реже акцепторных, примесей.

Захваченные электроны имеют малую вероятность высвобождения. Число захваченных электронов пропорционально поглощенной дозе излучения.

Нагрев кристалла может привести к высвобождению электрона, после чего он рекомбинирует с дыркой на центре люминесценции L, возбуждая последний в состояние L^*. Возбуждение частично переходит в световое излучение, которое регистрируется ФЭУ, затем информация представляется в виде ТЛ-кривой.

Используемый тип детектора (ТЛД-500) имеет ряд преимуществ для работы, он имеет относительно низкую энергетическую зависимость чувствительности, феднинг 3%/год [3]. Для детектора на основе Al_2O_3 характерно наличие одного пика термовысвечивания, что значительно упрощает работу, при считывании информации одновременно обнуляются дозовые показания и детектор становится готов к следующим измерениям, без предварительного проведения сложных термо-временных обработок.

Из теоретических сведений можно сделать вывод о том, что предел измеряемой дозы пропорционален максимальному числу захваченных электронов ловушками детектора. Следовательно, для изменения чувствительности нужно менять концентрацию точечных дефектов детектора Al_2O_3 в форме вакансий кислорода (центры типа F^-), чтобы оптимизировать процесс дозовых измерений.

Было выявлено, что термооптическая обработка (ТОО) позволяет менять концентрацию F^+ -центров в кристаллах α-Al_2O_3-δ относительного исходного содержания [4], что переводит детектор в одно из четырех основных состояний.

В ходе работы детекторы были введены в их промежуточное состояние для оценки их дозиметрических свойств.

1. Люминесценция твердых тел: учебное пособие / В. А. Пустоваров. — Екатеринбург: Изд во Урал. ун та, 2017 — С. 8–11.
2. Крамер-Агеев Е. А., Трошин В. С. Инструментальные методы радиационной безопасности: Учебное пособие. – М.: НИЯУ МИФИ, 2011, 88 с.
3. Дозиметрия: учебно-методическое пособие / А. А. Баранова, А.П. Оконечников, В.А. Пустоваров; Мин-во науки и высш. образования РФ. — Екатеринбург: Изд-во Урал. ун-та, 2020.— 112 с
4. Войнов В. С. УСТАНОВКА ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ ОБРАЗЦОВ α-Al2O3-δ / В. С. Войнов, И. И. Мильман // Физика. Технологии. Инновации: тезисы докладов VII Международной молодежной научной конференции, посвященной 100-летию Уральского федерального университета (Екатеринбург, 18–22 мая 2020 г.). — Екатеринбург: УрФУ, 2020. — С. 458–460.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ГРАФИТОПОДОБНОГО НИТРИДА УГЛЕРОДА С УЧЕТОМ ВАРЬИРОВАНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ

Ильяшенко И.Н.[1], Мартемьянов Н.А.[1], Ищенко А.В.[1], Звонарев С.В.[1, 2], Вайнштейн И.А.[1, 3]

[1)] НОЦ НАНОТЕХ, Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт", г. Москва, Россия
[3)] Институт металлургии УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: i.n.ilyashenko@urfu.ru

DFT-MODELLING OF G-C3N4 ELECTRONIC STRUCTURE ALLOWING FOR POLYMERIZATION TEMPERATURE VARIATION

Ilyashenko I.N.[1], Martemianov N.A.[1], Ischenko A.V.[1], Zvonarev S.V.[1, 2], Weinstein I.A.[1, 3]

[1)] NANOTECH Centre, Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia
[2)] National Research Center "Kurchatov Institute", Moscow, Russia
[3)] Institute of Metallurgy of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russia

We have studied electronic band structure of g-C_3N_4 using DFT method. It is found that energies of both direct and indirect optical transitions are decreasing linearly for samples synthesized at different temperatures. The results obtained are consistent with the experimental estimations.

Графитоподобный нитрид углерода (g-C_3N_4) привлекает внимание исследователей как перспективный материал для применений в фотокатализе, при производстве водорода в реакциях разложения воды, для создания эффективных устройств опто- и наноэлектроники. Понимание закономерностей формирования оптических и электронных свойств и их зависимости от условий синтеза позволит создавать функциональные среды на основе g-C_3N_4 с желаемыми характеристиками. В данной работе для образцов g-C_3N_4, синтезированных при разных температурах полимеризации Tp, выполнены расчеты особенностей электронного строения с использованием метода теории функционала плотности (DFT).

Ранее [1] с использованием рентгеновской дифракции было показано, что полимеризованные цепочки мелона являются основными структурными единицами для образцов g-C_3N_4, синтезированных путем термической поликонденсации мочевины при температурах Tp в диапазоне 450–600°C. Было показано, что с увеличением Tp указанные цепочки удаляются друг от друга, тогда как слои сближаются между собой.

С учетом вышеуказанного в данной работе построены модельные структуры на основе мелоновых цепочек в ортогональной решетке с варьируемыми параметрами ячейки a = 15.8–16.4, b = 12.1, c = 3.287–3.25 Å, которые соответствуют различным значениям Tp. DFT-моделирование электронной структуры проведено в программном пакете с открытым исходным кодом Quantum ESPRESSO. Для расчетов использован гибридный функционал B3LYP, выбрана граничная энергия 60 Ry, методом Монкхорста-Пака задана сетка k-точек размерностью 2x2x10 для интегрирования по зоне Бриллюэна. Результаты моделирования проанализированы в рамках сравнения с экспериментальными данными нашей работы [2], в которой оценки ширины энергетической щели синтезированных структур g-C_3N_4 были выполнены с помощью спектроскопии диффузного отражения.

На основе моделирования электронных состояний в точках высокой симметрии зоны Бриллюэна показано наличие непрямого перехода Z–Г, ширина которого линейно снижается в диапазоне 2.77–2.67 эВ с ростом температурного параметра Tp. Установлено, что подобным образом изменяются энергии непрямых переходов X–Г (4.19–4.16), Y–Г (4.51–4.49) и прямого перехода Г–Г (4.18–4.16 эВ), которые при этом значительно превосходят соответствующие экспериментальные оценки: 2.84–2.72 эВ для непрямых разрешенных переходов и 3.07–3.01 эВ для прямых разрешенных переходов [2].

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Программы развития Уральского федерального университета имени первого Президента России Б.Н. Ельцина в соответствии с программой стратегического академического лидерства "Приоритет-2030".

1. Ильяшенко И. Н., Мартемьянов Н.А., Камалов Р.В., Вохминцев А.С., Ищенко А.В., Вайнштейн И.А., Физика. Технологии. Инновации: тезисы докладов XI Международной молодежной научной конференции, С. 194–195 (2022)
2. Мартемьянов Н.А., Ильяшенко И. Н., Камалов Р.В., Ищенко А.В., Вайнштейн И.А., Влияние температуры синтеза на собственную люминесценцию g-C_3N_4, Известия Российской академии наук. Серия физическая, Т. 86, С. 1435–1440 (2022)

СРАВНЕНИЕ СИСТЕМ РЕГИСТРАЦИИ РЕНТГЕНОВСКИХ СПЕКТРОВ И ИЗОБРАЖЕНИЙ В РАЗЛИЧНОЙ КОМБИНАЦИИ ПАРЫ «ДЕТЕКТОР–КАМЕРА»

Кантур И.Э[1], Ярмошенко Ю.М[1], Долгих В.Е.[1], Кузнецова Т.В[1,2]
[1)] Институт физики металлов имени М. Н. Михеева УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: kantur@imp.uran.ru

COMPARISON OF SYSTEMS FOR REGISTRATION OF X-RAY SPECTRA AND IMAGES IN VARIOUS COMBINATIONS OF “DETECTOR-CAMERA” PAIR

Kantur I.E.[1], Yarmoshenko Yu.M[1], Dolgikh V.E.[1], Kuznetsova T.V[1, 2]
[1)] M.N. Mikheev Institute of Metal Physics, Yekaterinburg, Russia
[2)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

An X-ray image registration system consisting of a detector, an optical lens and a digital video camera is described. The measurements were performed using detectors with different gain coefficients and two video cameras with different characteristics and pixel sizes.

Для изучения качества регистрации изображения и спектров в нашем распоряжении было два детектора с разными коэффициентами усиления и две видеокамеры. Как предполагает производитель, коэффициент усиления детектора “Циркон 1” К1 = 10^7, а детектора “Циркон 2” К2 = 10^6. Оба детектора содержат по две сопряженные МКП. Видеокамеры – BMR-1400HM-U (№ 1) и ZWO 485 MC (№ 2).

Важными характеристиками ПЗС-камер являются отношение сигнал/шум, скорость передачи кадров, временное разрешение, размер пикселя и пространственное разрешение, спектральный диапазон, квантовый выход и динамический диапазон. Сравнение экспериментальных результатов, полученных в различной комбинации пары детектор–камера, показало, что качество изображения и соответствующих спектров значительно выше для детектора “Циркон 1”. На рисунке выделены участки графиков, практически идентичные для выбранной камеры. При этом аналогичный участок для другой камеры будет отличаться. Это означает, что каждая камера обладает индивидуальной характеристикой (шума), которая частично воспроизводится в процессе измерений. Кроме того, для небольшой части пикселей наблюдается аномальная интенсивность при отсутствии освещения ПЗС-матрицы. Эту информацию легко использовать для исправления спектра. Структура фона частично обусловлена выбором конкретной камеры. Неравномерный шум имеет тепловое происхождение. Для учета шума мы используем стандартные

алгоритмы частотного анализа методом фурье-преобразования экспериментальных спектров и ограничения частотного интервала. Эта процедура применяется индивидуально для каждого эксперимента и камеры. Управление процессами измерения, наблюдения и обработки экспериментальных результатов выполняется при помощи визуального интерфейса [2].

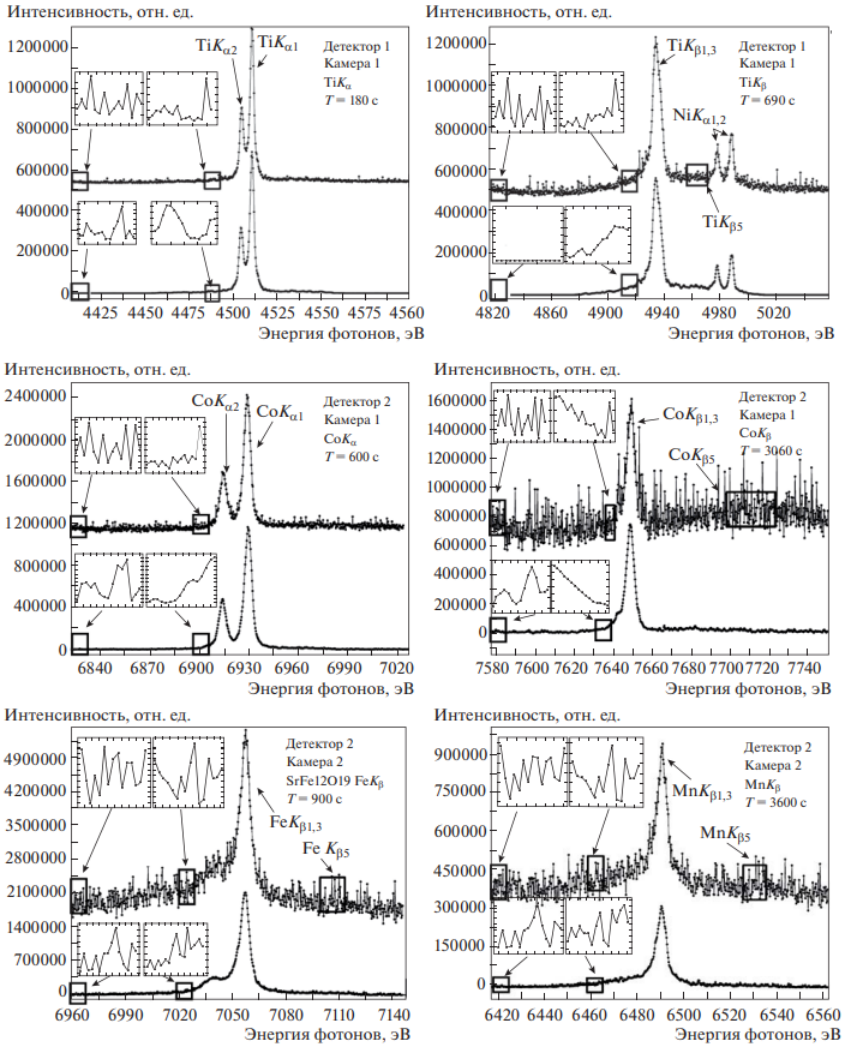


Рис. 1. Спектры, измеренные при использовании различных комбинаций пар “детектор–видеокамера”. Верхняя кривая – спектр с шумами, нижняя – после фильтрации.

Энергетический масштаб зависит от условий эксперимента и выбора камеры. При съемке камерой №1 $\Delta E/\Delta N \approx 0.15$ эВ, где E – энергия фотонов, N – число пикселей. Например, для дублета CoK$\alpha_{1,2}$ $\Delta E = 15$ эВ или 96 пикселей, $\Delta E/\Delta N = 0.156$ эВ. На всех графиках, полученных с помощью первой камеры, масштаб уменьшен в два раза. При съемке камерой № 2 масштаб на графиках уменьшен в

три раза и $\Delta E/\Delta N \approx 0.3$ эВ. Линейный размер междублетного расстояния $CoK\alpha_1,2$ спектра равен 96 х 6.45 мкм ≈ 620 мкм. Уменьшение масштаба не приводит в конкретных условиях съемки к ухудшению разрешения и равносильно увеличению размера пикселя. Это важно для выбора камеры, поскольку от размера пикселя в ПЗС критически зависят характеристики шума, который уменьшается с увеличением пикселя. Поэтому для изучения спектров вполне пригодны камеры с размером пикселя примерно 10 мкм. Для детектора коэффициент усиления необходим не меньше 10^7 для достижения удовлетворительного соотношения сигнал/шум [1].

Работа выполнена в рамках государственных заданий Минобрнауки России (темы: "Спин", г.р. № 122021000036-3; "Электрон", г.р. № 122021000039-4)

1. Ю. М. Ярмошенко, И. Э. Кантур, В. Е. Долгих, Т. В. Кузнецова Регистрация рентгеновского изображения с помощью детектора на основе микроканальных пластин
2. Кантур И.Э., Долгих В.Е., Ярмошенко Ю.М., Кузнецова Т.В. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2022660528 // Опубл. 06.06.2022.

ДЕКОРИРОВАНИЕ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ СВЕРХГИДРОФОБНЫХ ПОКРЫТИЙ

Капустин С. Н.[1]
[1)] САФУ им. М. В. Ломоносова
E-mail: hare22@yandex.ru

DECORATION OF CARBON NANOTUBES FOR OBTAINING SUPERHYDROPHOBIC COATINGS

Kapustin S.N.[1]
[1)] Northern (Arctic) Federal University named after M.V. Lomonosov

In early works, a superhydrophobic anti-icing coating based on carbon nanoparticles was proposed. The coating consists of two functional layers - a heating layer and a hydrophobic layer. Further development of this technology is proposed. The coating properties are improved by decorating CNT.

В работе [1] нами был предложен подход, в котором предлагалось получать покрытие из размолотого ксерогеля, наклеиваемого на защищаемую поверхность. Ксерогель предлагалось изготовлять из углеродных нанотрубок (УНТ), что в перспективе позволяет сочетать все три основных подхода по получению сверхгидрофобных покрытий. Высокое аспектное соотношение УНТ позволяет воспроизводить эффект лотоса, большая сорбционная емкость ксерогеля — использовать лубрикант для пропитки антиобледенительным агентом или водоотталкивающим составом для оперативного ремонта поврежденных мест. Кроме того, сами по себе УНТ гидрофобны и не нуждаются в дополнительной химической обработке. Подход был развит в работе [2], где для создания ксерогеля использовались углеродные нанолуковицы (OLC - Onion-like carbon), полученные дешевым и технологичным методом. От наклеивания ксерогеля было предложено перейти к напылению наночастиц в растворителе и формированию ксерогеля прямо на защищаемой поверхности — это значительно повысило технологичность приготовления покрытия, но выявило необходимость в придании поверхности изначальной шероховатости определенного масштаба. Были изучены антиобледенительные и сорбционные свойства предлагаемого покрытия. Данная работа представляет собой дальнейшее развитие этих идей.

Одной из основных уязвимостей сверхгидрофобных покрытий, используемых в качестве антиобледенительных является проблема сопротивлению образования инея и конденсата в глубине структуры, создающей эффект лотоса. Особенна эта проблема актуальна для наноструктур на основе графена или УНТ – у них имеются практический плоские поверхности, на которых кристаллы инея или капли конденсата могут расти практический без

ограничений. Разрастаясь, конденсат перекрывает шероховатости рельефа что сводит на нет проявления эффекта Лотоса. Одним из выходов является технология декорирования, то есть покрытия боковых сторон пластинок графена или стенок УНТ более миниатюрными наночастицами. Декорирование близко к нековалентной функциализации линейными полимерами и подобными веществами.

Декорирование УНТ фуллеренами позволило увеличить краевой контактный угол до с 151 до 163 градусов и почти на треть замедлить образование обледенения на поверхности. В ходе доклада будут озвучены оптимальные условия для выполнения декорирования, а также влияние декорирования других наночастиц - ДНА, нанокристаллов SiO_2 и парафина.

1. Eseev M.K., Goshev A.A., Kapustin S.N., Tsykareva Y.V. Creation of Superhydrophobic Coatings Based on MWCNTs Xerogel // Nanomaterials. 2019. V. 9. P. 1584.
2. Есеев М.К., Капустин С.Н., Лугвищук Д.С., Мордкович В.З., Лях Н.Л. Сверхгидрофобное покрытие из углеродных наночастиц луковичной структуры // Письма в ЖТФ. 2020. № 22, С. 19.

ОСОБЕННОСТИ КИНЕТИКИ ТЕРМОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ КЕРАМИК ZrO_2: Ce, СИНТЕЗИРОВАННЫХ ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВЫМ МЕТОДОМ

Касаткина Я.П.[1], Никифоров С.В.[1], Лисицын В. М.[2], Голковский М.Г.[3], Даулетбекова А.[4]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Томский политехнический университет, г. Томск, Россия
[3)] Институт ядерной физики, СО РАН, г. Новосибирск, Россия
[4)] Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан
E-mail: anakasatkina660@gmail.com

FEATURES OF THERMOLUMINESCENCE KINETICS OF ZrO_2 CERAMICS SYNTHESIZED BY ELECTRON BEAM METHOD

Kasatkina Y.P.[1], Nikiforov S.V.[1], Lisitsyn V.M.[2], Golkovskii M.G.[3], Dauletbekova A.[4]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia
[2)] Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russia
[3)] Institute of Nuclear Physics, SB RAS, Novosibirsk, Russia
[4)] L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

Luminescent properties of ceramics of zirconium dioxide (ZrO_2) synthesized by electron beam method are investigated. On the TL curves in the samples, a dominant TL peak was detected at 425-430 K, excited by a pulsed electron beam. The kinetic parameters of the TL peak were determined by two methods.

Одной из важных задач дозиметрии является измерение доз сильноточных импульсных электронных пучков, которые могут составлять 1–500 кГр. Перспективным материалом для высокодозной люминесцентной дозиметрии являются керамики на основе диоксида циркония. Одним из способов получения керамик является электронно-лучевой метод, заключающийся в термообработке исходного порошка при облучении потоком высокоэнергетических электронов [1]. Термолюминесцентные (ТЛ) свойства керамик диоксида циркония, полученных указанным методом, ранее не исследовались. Целью работы является исследование особенностей кинетики ТЛ керамик ZrO_2, легированных примесью церия и синтезированных в потоке высокоэнергетических электронов.

Для синтеза керамик шихта, содержащая микронный порошок диоксида циркония с примесью Ce (1%), подвергалась облучению электронами с энергией 1.4 МэВ и плотностью мощности 23 кВт/см^2 от ускорителя ЭЛВ-6 (ИЯФ СО РАН, г. Новосибирск). Для возбуждения ТЛ образцы облучались при комнатной температуре импульсным электронным пучком (60 А/см^2, 2 нс) ускорителя «РАДАН ЭКСПЕРТ» с энергией электронов 130 кЭв. Доза облучения составляла

7.5 кГр за один импульс. ТЛ измерялась при линейном нагреве со скоростью 2 К/с с помощью ФЭУ-130 с областью спектральной чувствительности 200–600 нм. Для сравнения были исследованы также ТЛ свойства компактов ZrO_2, изготовленных из микронного порошка методом холодного одноосного прессования.

Анализ кривых ТЛ образцов обоих типов показал, что в керамиках ZrO_2, полученных электронно-лучевым методом, доминирующий пик ТЛ сдвинут на 40 К в высокотемпературную область по сравнению с пиком ТЛ компактов. Для выяснения причин указанного эффекта были рассчитаны кинетические параметры ТЛ (энергия активации E, частотный фактор S) образцов двух типов. Поскольку образцы керамик имели сложную форму, расчет кинетических параметров был проведен методом вариации скорости с учетом температурного градиента между образцом и нагревателем по методике, изложенной в работе [2]. Кинетические параметры также определялись методом анализа формы пика [3].

Полученные результаты приведены в таблице 1. Видно, что значения энергий активации ТЛ, определенных разными методами, согласуются между собой. Из таблицы видно также, что энергия активации ТЛ пика керамик, синтезированных электронно-лучевым методом, существенно превышает ее значения для компактов ZrO_2. Данная закономерность и обусловливает сдвиг ТЛ пика керамик в высокотемпературную область. Причиной указанного эффекта может являться изменение энергетической структуры центров захвата, ответственных за доминирующий пик ТЛ, в керамиках ZrO_2, подвергнутых терморадиационной обработке при синтезе.

Метод	Керамика ZrO2		Компакты ZrO2	
	E, эВ	S, c^{-1}	E, эВ	S, c^{-1}
Анализ формы пика	1,09	$3{,}9 \cdot 10^{9}$	0,47	$1{,}1 \cdot 10^{10}$
Метод вариации скоростей	1,00	$6{,}8 \cdot 10^{6}$	0,63	$4{,}5 \cdot 10^{11}$

Таблица 1 - Энергия активации и фактор формы образцов, полученные разными методами.

1. V. Lisitsyn, L. Lisitsyna, A. Dauletbekova, M. Golkovskii, Zh. Karipbayev, D. Musakhanov, A. Akilbekov, M. Zdorovets, A. Kozlovskiy, E. Polisadova. Luminescence of the tungsten-activated MgF2 ceramics synthesized under the electron beam. Nuclear Inst. and Methods in Physics Research B 435 (2018) 263–267
2. G. Kitis, J.W.N. Tuyn. J. Phys. D: Appl. Phys. 31, 2065 (1998)
3. R. Chen and V. Pagonis. Thermally and Optically stimulated Luminescence: A simulation approach. Wiley, 2011. 419 p.

ИЗУЧЕНИЕ НЕАДДИТИВНОСТИ ПРОЦЕССОВ КАВИТАЦИОННОГО И ЭЛЕКТРОКОРРОЗИОННОГО РАЗРУШЕНИЯ ПОВЕРХНОСТИ МЕТАЛЛОВ, ИЗГОТОВЛЕННЫХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ 3D-ПЕЧАТИ

Керимов Р.С.[1], Капустин С.Н.[1]
[1)] Северный (арктический) федеральный университет им. М.В. Ломоносова, Архангельск, Россия
E-mail: r.s.kerimov@mail.ru

STUDYING THE NON-ADDITIVITY OF PROCESSES OF CAVITATION AND ELECTROCHEMICAL CORROSION IN THE SURFACE DESTRUCTION OF METALS MANUFACTURED USING 3D PRINTI

Kerimov R.S.[1], Капустин С.Н.[1]
[1)] Nothern (Arctic) Federal Univesity named after M.V.Lomonosov, Arkhangelsk, Russia

The processes of destruction on the surface of nickel alloy (Inconel 625) samples under the influence of intense ultrasound, cavitation, and electrocorrosion in seawater have been studied. Control samples were made using a 3D printer.

Методы производства металлических деталей с использованием 3D-печати становятся все более распространенными в различных областях промышленности. Однако, из-за специфических процессов, используемых при изготовлении, такие детали могут обладать некоторыми отличительными свойствами, которые могут влиять на их долговечность и надежность. Один из таких факторов — это возможность возникновения кавитации и электрохимической коррозии в процессе эксплуатации. Цель данного исследования - изучить взаимодействие процессов кавитации и электрохимической коррозии в поверхностном разрушении металлов, изготовленных с использованием 3D-печати.

Для изучения взаимодействия процессов кавитации и электрохимической коррозии использовался метод исследования поверхности металла при помощи сканирующей электронной микроскопии.

Методы 3D-печати металлических деталей могут приводить к наличию микродефектов и неровностей поверхности, которые могут стать местом образования кавиатции [1].

Электрохимическая коррозия может происходить на поверхности металла, изготовленного с использованием 3D-печати, в результате неоднородности микроструктуры и наличия различных включений.

Процессы кавитации и электрохимической коррозии могут не суммироваться линейно и проявлять некоторые неклассические эффекты неаддитивности [2].

Изучение неклассических эффектов неаддитивности может быть полезно для понимания механизмов поверхностного разрушения металлов, изготовленных с использованием 3D-печати, и разработки эффективных методов защиты от коррозии и кавитации.

1. Li, W., Gao, H., & Wang, T., Materials Science and Engineering: A, 742, 183-198, (2019)
2. Lee, H. J., & Lee, J. H., Ultrasonics sonochemistry, 38, 880-888, (2017)

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ДЕФЕКТОВ СТРУКТУРЫ НА НЕРАВНОВЕСНОЕ КРИТИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ АНИЗОТРОПНОЙ МОДЕЛИ ГЕЙЗЕНБЕРГА

Хитринцева В.В.[1], Прудников В.В.[1]
[1)] Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского, г. Омск, Россия
E-mail: KhitrintcevaVV@stud.omsu.ru

STUDY OF STRUCTURE DEFECTS INFLUENCE ON THE NONEQUILIBRIUM CRITICAL BEHAVIOR OF THE ANISOTROPIC HEISENBERG MODEL

Khitrintseva V.V.[1], Prudnikov V.V.[1]
[1)] F.M. Dostoevsky Omsk State University, Omsk, Russia

The Monte Carlo study of structural disorder influence on nonequilibrium critical behavior of three-dimensional anisotropic Heisenberg model has performed. It is shown that presence of disorder leads to radically changes of characteristics of nonequilibrium critical behavior of this model.

Важным вопросом при изучении свойств материалов являются фазовые переходы второго рода и критические явления, поскольку в области фазового перехода происходят радикальные изменения их характеристик, сопровождающиеся возникновением сильно коррелированных и долгоживущих флуктуаций. К наиболее интересным статистическим моделям для описания критических явлений относится трехмерная анизотропная модель Гейзенберга, учитывающая эффекты магнито-кристаллографической анизотропии [1], характерные для реальных объемных материалов.

В ходе работы проведено численное Монте-Карло исследование особенностей влияния точечных дефектов структуры на неравновесное критическое поведение анизотропной модели Гейзенберга с анизотропией типа «легкая ось». Рассматриваются замороженные точечные дефекты структуры, что соответствует наиболее распространенной модели структурного беспорядка в области критического поведения магнитоупорядоченных твердых тел. Гамильтониан структурно неупорядоченной анизотропной модели Гейзенберга представлен в виде [2]:

$$H = - J \sum p_i p_j [(1-\Delta) (S^x_i S^x_j + S^y_i S^y_j) + S^z_i S^z_j],$$

где $J > 0$ – константа обменного взаимодействия между спинами, $\{S^x_i, S^y_i, S^z_i\}$ – компоненты трехмерного единичного вектора спина; p_i, p_j - числа заполнения, принимают значения 0 или 1: если в i-м узле находится спин, то $p_i = 1$, иначе $p_i = 0$; Δ - параметр анизотропии. В проводимом исследовании $\Delta = 0.63$ [3].

Рассмотрено неравновесное критическое поведение систем с различной спиновой концентрацией p = 1.0, 0.9, 0.8, 0.6, 0.5 при эволюции из

низкотемпературного начального состояния с намагниченностью $m_0 = 1$ и высокотемпературного начального состояния с $m_0 \ll 1$:

1. Выявлены эффекты старения в двухвременной зависимости автокорреляционной функции $C_z(t, t_w)$ и динамической восприимчивости $\chi(t, t_w)$, т.е. замедление временного спадания при увеличении «возраста» системы t_w. Возникающее при этом явление «сверхстарения» сильнее проявляется для случая релаксации системы из низкотемпературного начального состояния с $m_0=1$.

2. Исследовано нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы и рассчитано значение предельного ФДО.

3. Определено, что критическое поведение трехмерной анизотропной модели Гейзенберга с анизотропией типа «легкая ось» является изингоподобным. В результате, согласно критерию Харриса, дефекты структуры приводят к существенному изменению характеристик неравновесного критического поведения системы как при эволюции из высокотемпературного начального состояния, так и при эволюции из низкотемпературного начального состояния.

4. На основе значений предельного ФДО и критических индексов, определенных из анализа временной зависимости намагниченности, для систем с различными спиновыми концентрациями выявлено три класса универсальности критического поведения, соответствующие чистой, слабо неупорядоченной и сильно неупорядоченной системам.

Исследования проведены с использованием ресурсов Центра коллективного пользования научным оборудованием «Центр обработки и хранения научных данных ДВО РАН», финансируемого Минобрнауки России по соглашению № 075-15-2021-663.

1. Прудников В.В., Прудников П.В., Мамонова М.В. Квантово-статистическая теория твердых тел. СПб.: Лань, (2016)
2. Binder K., Landau D.P., Phys. Rev. B, 13,1140, (1976)
3. Прудников П.В., Прудников В.В., Медведева М.А., Письма в ЖЭТФ, 100, 501, (2014)

ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ФОРМИРОВАНИЯ ДОМЕННОЙ СТРУКТУРЫ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ ИОННЫМ ПУЧКОМ МОНОДОМЕННЫХ ОБЛАСТЕЙ В НИОБАТЕ БАРИЯ-СТРОНЦИЯ

Холоденко М.Д.[1], Пашнина Е.А.[1], Ахматханов А.Р.[1], Небогатиков М.С.[1], Шихова В.А.[1], Слаутина А.С.[1], Чезганов Д.С.[1]
[1)] Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург
E-mail: Maria.Kholodenko@urfu.me

INVESTIGATION OF PECULIARITIES OF DOMAIN STRUCTURE FORMATION BY ION BEAM IRRADIATION OF MONODOMAIN REGIONS IN STRONTIUM BARIUM NIOBATE

Kholodenko M.D.[1], Pashnina E.A.[1], Akhmatkhanov A.R.[1], Nebogatikov M.S.[1], Shikhova V.A.[1], Slautina A.S.[1], Chezganov D.S.[1]
[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia B.N.Yeltsin, Ekaterinburg

The formation of domain structure during the ion beam irradiation of monodomain regions of SBN crystals has been studied. The regularities of formation, threshold values of depth of sprouting of point and stripe domains, dependences of parameters of domains in matrix and isolated on dose are shown.

Проведено исследование формирования доменной структуры (ДС) при облучении ионным пучком монодоменных областей монокристаллов ниобата бария-стронция ($Sr_{0,61}Ba_{0,39}Nb_2O_6$, SBN). Выявлены основные закономерности формирования точечных и полосовых доменов. Определены зависимости параметров изолированных доменов и доменов в матрице от дозы облучения. Определены предельные значения глубины прорастания доменов.

Кристаллы SBN могут использоваться для создания управляемых электрическим полем дифракционных оптических элементов [1] и фотонных кристаллов нового поколения [2]. Практический интерес представляет создание кристаллов SBN с регулярной ДС с заданной геометрией.

При комнатной температуре кристаллы SBN исследованного состава являются полидоменными. Создание монодоменных областей проводилось при помощи облучения поверхности сфокусированным электронным пучком с дозами облучения от 100 до 200 мкКл/см^2, а поверх них проводилась запись ДС ионным пучком. На облучаемую Z^- поверхность наносился искусственный диэлектрический слой (фоторезист), а на Z^+ поверхность – сплошной Cu электрод. Контроль качества ДС в монодоменных областях на поверхности проводился при помощи оптической микроскопии, а в объеме – микроскопии генерации второй гармоники (МГВГ).

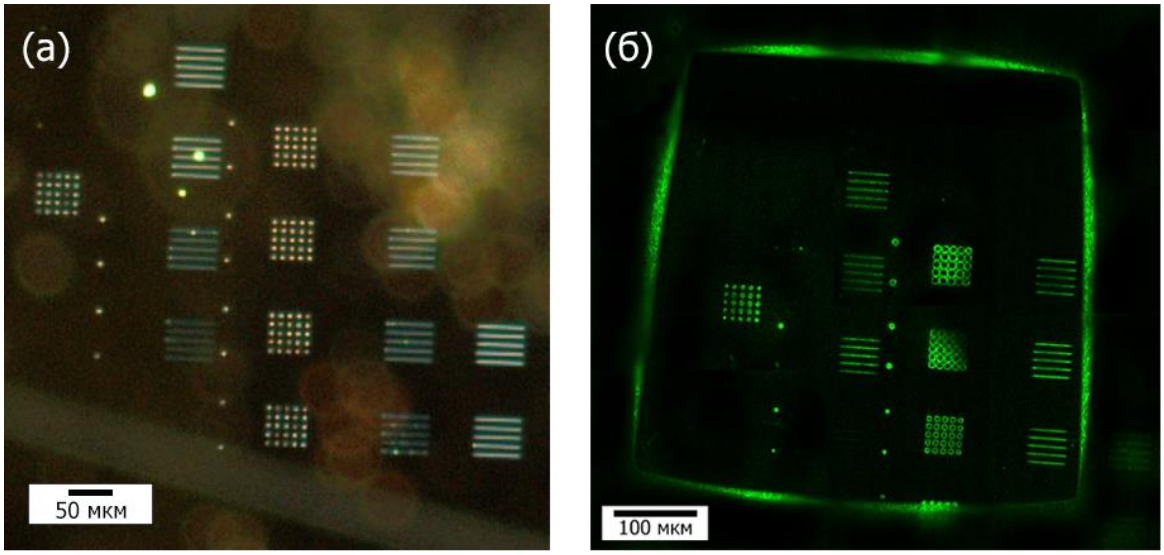


Рис. 1. Доменные структуры, записанные в монодоменной области сфокусированным ионным пучком и визуализированные методами (а) оптической микроскопии и (б) МГВГ

Точечное облучение матриц 5×5 точек с периодом 10 мкм и изолированных точек дозами облучения от 10 до 50 пКл, приводило к формированию круглых доменов (см. рисунок 1). Показано, что с увеличением дозы облучения глубина прорастания увеличивается и происходит линейное увеличение площади доменов. При одних и тех же дозах облучения изолированные домены были в 2,7 раза меньше, чем домены в матрице, что обусловлено взаимодействием сближающихся доменных стенок соседних доменов. При дозах облучения более 40 пКл изолированные домены прорастают сквозь всю глубину образца, а матрицы – при дозах более 10 пКл, однако на глубине 250 мкм происходит частичное слияние отдельных доменов и искажение формы.

В результате облучения вдоль линии с дозами от 20 до 100 мкКл/см происходило формирование полосового домена. Показано, что при увеличении дозы облучения увеличивается глубина прорастания и ширина полосовых доменов. При одних и тех же дозах облучения полосовые домены в решетке прорастали в 2,5 раза глубже, чем изолированные, что объясняется влиянием электрических полей от соседних облученных линейных областей на прорастание полосового домена в решетке. При дозах облучения более 50 мкКл/см полосовые домены в решетке прорастают на всю глубину образца, изолированные – менее чем на середину кристалла.

Показано, что с помощью сфокусированного ионного пучка в монодоменных областях можно создавать ДС с произвольной ориентацией доменных стенок.

Полученные результаты представляют значительный интерес для дальнейшего развития методов доменной инженерии в кристаллах SBN.

Работа выполнена с использованием оборудования УЦКП «Современные нанотехнологии» УрФУ (рег.№ 2968), при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант 21-72-10160).

1. Mávita J. et al. Switchable phase/intensity sensor made with ring-shaped and hexagonal ferroelectric domains // Appl. Opt. 2018. Vol. 57, № 9. P. 2208.
2. Li J. et al. Tunable negative refraction based on the Pockels effect in two-dimensional photonic crystals composed of electro-optic crystals // Journal of Applied Physics. 2007. Vol. 101, № 1. P. 013516.

ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ ИОНОВ Pr^{3+} И ЦЕНТРЫ ЗАХВАТА НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В $Sr_3Lu_2Ge_3O_{12}$ И $Ba_9Lu_2Si_6O_{24}$

Киселев С.А.[1], Пустоваров В.А.[1], Ши Ч.[2]
[1)] Физико-технологический институт, Уральский Федеральный Университет, 620002, Россия, Екатеринбург, ул. Мира, 19
[2)] Колледж Физики и Оптоэлектроники, Тайюаньский Технологический Университет, 030024, Китай, Тайюань
E-mail: sviat-kiselev@yandex.ru

PR^{3+} IONS LUMINESCENCE AND CHARGE CARRIER TRAPPING CENTERS IN $Sr_3Lu_2Ge_3O_{12}$ И $Ba_9Lu_2Si_6O_{24}$

Kiselev S.A.[1], Pustovarov V.A.[1], Shi Q.[2]
[1)] Institute of Physics and Technology, Ural Federal University, 19 Mira st., 620002, Ekaterinburg, Russia
[2)] College of Physics and Optoelectronics, Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024, China

This paper reports the spectroscopic properties of silicates and germanates $Sr_3Lu_2Ge_3O_{12}$ and $Ba_9Lu_2Si_6O_{24}$ doped with Pr^{3+} ions with different concentration. Spectra of X-ray excited luminescence as well as thermally stimulated luminescence were studied for nominally pure and Pr^{3+} doped samples.

В последнее время уделяется большое внимание исследованию новых сцинтилляционных материалов на основе неорганических соединений, легированных ионами редкоземельных ионов. Это обусловлено их уникальными свойствами, позволяющих прогнозировать успешное применение в различных сферах, таких как системы детектирования, медицинская томография и т.д. Основные люминесцентные свойства определяются преимущественно за счет быстрых межконфигурационных 5d – 4f излучательных переходов и медленных внутриконфигурационных 4f – 4f переходов. Ионы Pr^{3+} по сравнению с ионами Ce^{3+}, широко распространенных в коммерческих приложениях, имеют ряд преимуществ, в том числе: более высокая энергия 5d – 4f эмиссии, лучшие временные характеристики (время затухания τ = 20-30 нс вместо 30-60 нс для Ce^{3+}) [1, 2] В ионах Pr^{3+} излучательные 5d – 4f переходы обычно доминируют в спектрах люминесценции, когда сильное кристаллическое поле сдвигает зону смешанной $4f^15d^1$ электронной конфигурации ниже возбужденного уровня $^1S_0$ [3].

Исследуемые образцы $Sr_3Lu_2Ge_3O_{12}$ и $Ba_9Lu_2Si_6O_{24}$ являются потенциально перспективными материалами для сцинтилляционных приложений. В данной работе исследуются зависимости спектров рентгенолюминесценции и термостимулированной люминесценции микрокристаллов от концентрации ионов Pr^{3+} в диапазоне температур 90–500 К. Образцы синтезированы и

аттестованы методом порошковой дифракции в Тайюаньском университете (Китай). Как можно наблюдать на рис. 1, для каждого соединения существует оптимальная концентрация примесных ионов, позволяющая получить максимальный световыход при рентгеновском возбуждении. В то же время кривые термовысвечивания содержат ряд пиков, отражающих концентрацию центров захвата носителей заряда, формирующих конкурирующий канал релаксации электронных возбуждений и определяющих интенсивность рентгенолюминесценции.

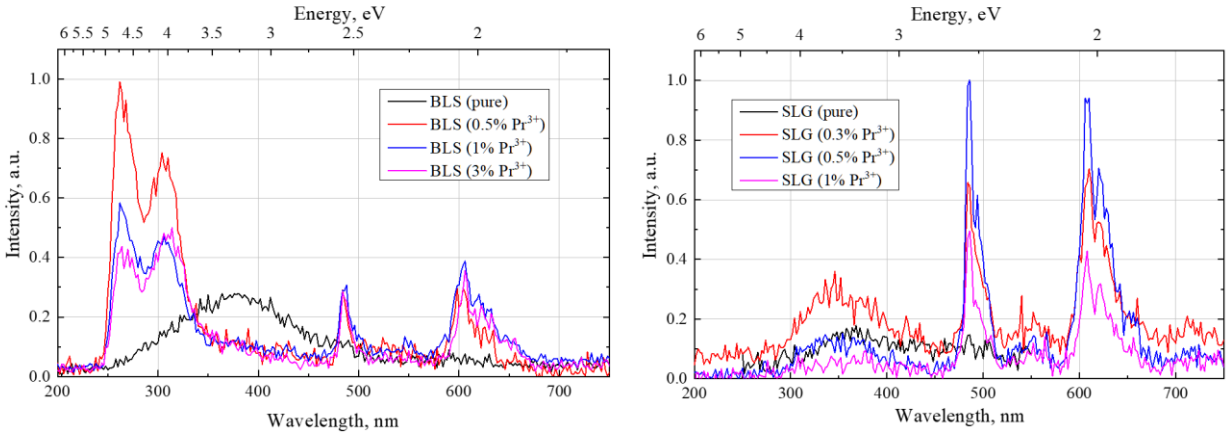


Рис. 1. Слева: Спектры рентгенолюминесценции $Ba_9Lu_2Si_6O_{24}$ с примесью ионов Pr^{3+}, T = 295 K. Справа: Спектры рентгенолюминесценции $Sr_3Lu_2Ge_3O_{12}$ с примесью ионов Pr^{3+}, T = 295 K.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (базовая часть государственного задания, проект № FEUZ-2023-0013).

1. K.V. Ivanovskikh, Q. Shi, M. Bettinelli, V.A. Pustovarov, Opt. Mater. 79, 108-114 (2018). DOI: 10.1016/j.optmat.2018.03.006
2. V.A. Pustovarov, A.N. Razumov, and D.I. Vyprintsev. Phys. Solid State 56, 347 (2018). DOI: 10.1134/S1063783414020267
3. A.M. Srivastava, J. Lumin. 169, 445–449 (2016). DOI: 10.1016/j.jlumin.2015.07.001

ВЛИЯНИЕ ДИСУЛЬФИДА ТИТАНА НА СВЕРХПРОВОДЯЩИЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ТЕЛЛУРИДА ЖЕЛЕЗА

Кислов Е.[1], Селезнева Н.В.[1], Баранов Н.В.[1, 2]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, ИЕНиМ, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: evgeny.kislov@urfu.ru

INFLUENCE OF TITANIUM DISULFIDE ON THE SUPERCONDUCTING AND MAGNETIC PROPERTIES OF IRON TELLURIDE

Kislov E.[1], Selezneva N.V.[1], Baranov N.V.[1, 2]
[1)] Ural Federal University, Institute of Natural Sciences and Mathematics, Yekaterinburg, Russia
[2)] Institute of Metal Physics of Ural Branch of Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia

It is shown that doping $Fe_{1.1}Te$ with TiS_2 leads to a change in the phase composition of the samples, deformation of the crystal lattice of the tetragonal phase, a decrease in the Néel temperature, and causes a phase transition to a superconducting state of a granular nature upon cooling below 9 K.

Соединение FeTe является антиферромагнетиком с температурой Нееля T_N = 70 K [1] и не демонстрирует перехода в сверхпроводящее состояние, однако замещения по подрешеткам металла и халькогена могут существенно влиять на его свойства [2].

В настоящей работе исследованы возможности индуцирования сверхпроводящего перехода в соединении $Fe_{1.1}Te$ путем добавления дисульфида титана $(TiS_2)_y$. Предполагалось, что при допировании атомы S будут занимать позиции теллура, а атомы Ti – позиции железа в тетрагональной структуре FeTe. Не обладающие магнитным моментом атомы титана, предположительно, будут выступать источниками дополнительных напряжений внутри кристаллической решетки, что должно положительно сказаться на сверхпроводящих свойствах [3].

Образцы системы $Fe_{1.1}Te(TiS_2)_y$ (y = 0, 0.04, 0.08, 0.1, 0.2) были получены в два этапа: на первом этапе плавлением при 920 ºС готовились матрицы $Fe_{1.1}Te$, на втором этапе матрицы допировались дисульфидом титана и повторно плавились с последующим медленным охлаждением для гомогенизации. Структура соединений исследовалась при помощи дифрактометра Bruker D8 Advance. Измерение температурных зависимостей электросопротивления проводилось стандартным 4-хконтактным методом с использованием рефрижератора CryoFree204 в интервале температур 2–180 K.

Согласно данным рентгеноструктурного анализа соединение $Fe_{1.1}Te$ кристаллизуется в тетрагональной структуре типа PbO, описываемой пространственной группой P4/nmm. Параметры решетки синтезированных нами образцов $Fe_{1.1}Te$ хорошо согласуются с литературными данными [1]. В допированных образцах $Fe_{1.1}Te$ $(TiS_2)_y$ помимо исходной фазы выявлено присутствие фробергита $FeTe_2$, а в образце с y = 0.2 также фазы TiS_2. Кроме того, установлено, что введение дисульфида титана в исходную матрицу приводит к уменьшению параметров кристаллической решетки тетрагональной фазы, что вызвано разницей в ионных радиусах Te^{2-} и S^{2-}.

Измерения электрического сопротивления показали, что допированные образцы, в отличие от исходного, демонстрируют переход в сверхпроводящее состояние ниже 9 K, однако завершения перехода удалось достичь только при понижении приложенного тока с I = 10 mA до 0.01 mA. Такое поведение может быть вызвано наличием примесных фаз, а также свидетельствовать о гранулированном характере сверхпроводимости.

На температурных зависимостях магнитной восприимчивости видно, что температура магнитного упорядочения, равная T_N = 64 K для исходного образца, уменьшается до 58 K для образца с y = 0.04, после чего переход подавляется. Кроме того, для образцов с y = 0.08 и 0.2 наблюдается смена типа магнитного упорядочения, что может быть связано с формированием фазы Fe_xTiS_2, которая, согласно [4], имеет широкий спетр возможных магнитных состояний в зависимости от концентрации железа.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (проект № FEUZ-2020-0054).

1. Maheshwari P.K., Jha R., Gahtori B., Awana V.P.S., Journal of Superconductivity and Novel Magnetism, 28, 2893-2897 (2015).
2. Takano Y., Mizuguchi Y., Journal of the Physical Society of Japan, 79, 102001 (2010).
3. Gimazov I.I., Kiyamov A.G., Lyadov N.M., Vasilyev A.N., Chareev D.A., Talanov Yu.I., JETP Letters, 113, 454-460 (2021).
4. Selezneva N.V., Baranov N.V., Sherokalova E.M., Volegov A.S., Sherstobitov A.A., Physical Review B, 104, 064411 (2021).

МАГНИТНЫЕ И СТРУКТУРНЫЕ СВОЙСТВА В $Fe_{7-x}M_xSe_8$ (M=Ti, Cr, Ni)

Горбов Л.Е.[1], Ключарев М.Д.[1], Селезнева Н.В.[1], Баранов Н.В.[1, 2]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
[2)] Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, Екатеринбург, Россия
E-mail: Klyucharev-maksim@mail.ru

MAGNETIC AND STRUCTURAL PROPERTIES IN $Fe_{7-x}M_xSe_8$ (M=Ti, Cr, Ni)

Gorbov L.E.[1], Klyucharev M.D.[1], Selezneva N.V.[1], Baranov N.V.[1, 2]
[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin, Ekaterinburg, Russia
[2)] M.N. Mikheev lnstitute of Metal Physics of Ural Branch of Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russia

In this work, we synthesized and studied the physical properties of $Fe_{7-x}M_xSe_8$ (M=Ti, Cr, Ni) compounds in order to study the effect of substitution in the cationic sublattice on the magnetic ordering temperature and magnitude of the magnetocaloric effect.

На сегодняшний день представляет интерес исследование магнитокалорического эффекта (МКЭ) в материалах, не содержащих редкоземельные элементы. Соединение Fe_7Se_8 – один из таких материалов. Ранее уже были получены данные о магнитотепловых свойствах (максимальное изменение магнитной энтропии ΔS_M и хладопроизводительность q) монокристалла Fe_7Se_8 в области спиновой переориентации (T_{sr} ~ 110–120 К) и в окрестности температуры магнитного упорядочения (T_c = 450 К). В первом случае параметры составили: ΔS_M = -0.54 Дж/кг·К, q = 19.7 Дж/кг (ось c параллельна вектору магнитного поля); во втором случае: ΔS_M = -0.60 Дж/кг·К, q = 4.2 Дж/кг (ось c перпендикулярна вектору магнитного поля); в обоих случаях магнитное поле изменялось от 0 до 20 кЭ [1]. Замещение в Fe_7Se_8 железа в катионной подрешетке на другие переходные металлы приводит к изменению температуры Кюри. Исходя из этого, нами была поставлена цель изменить температуру Кюри соединения и сместить область, в которой наблюдается МКЭ, в окрестность комнатной температуры, используя титан, хром или никель в качестве замещающих элементов.

Согласно ранее полученным нами экспериментальным данным, наибольший интерес для исследования представляют собой составы со стехиометрией $Fe_{5.05}Ti_{1.95}Se_8$, $Fe_{4.25}Cr_{2.75}Se_8$, $Fe_{5.25}Ni_{1.75}Se_8$. Данные образцы были синтезированы методом твердофазных реакций в вакуумированных кварцевых ампулах. Аттестация кристаллической структуры проводилась на дифрактометре Bruker

D8 Advance с использованием метода порошковой рентгеновской дифракции. Магнитные свойства исследованы при помощи измерений на СКВИД-магнитометре MPMS (Quantum Design) температурных и полевых зависимостей намагниченности. Оценка МКЭ осуществлялась по данным изополевых кривых M(T).

В ходе работы было установлено, что полученные образцы кристаллизуются в моноклинной сингонии с пространственной группой I2/m для соединения с никелем и P2/c для соединений с титаном и хромом. Из результатов измерений температурных зависимостей намагниченности M(T) следует, что составы $Fe_{5.25}Ni_{1.75}Se_8$ и $Fe_{5.05}Ti_{1.95}Se_8$ являются ферримагнетиками, а состав $Fe_{4.25}Cr_{2.75}Se_8$ является, по-видимому, антиферромагнетиком ниже температуры Нееля $T_N = 220$ К. При изменении магнитного поля от 0 до 15 кЭ для состава $Fe_{5.25}Ni_{1.75}Se_8$ параметры МКЭ составили: $T_c = 290$ К, $\Delta S_M = -0.07$ Дж/кг·К, $q = 3.71$ Дж/кг; для состава $Fe_{5.05}Ti_{1.95}Se_8$: $T_c = 340$ К, $\Delta S_M = -0.025$ Дж/кг·К, $q = 1.03$ Дж/кг.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 22-13-00158).

1. Radelytskyi I., Aleshkevych P., Gawryluk D.J., Berkowski M., Zajarniuk T., Szewczyk A., Gutowska M., Hawelek L., Wlodarczyk P., Fink-Finowicki J., Minikayev R., Diduszko R., Konopelnyk Y., Kozłowski M., Puz´niak R., Szymczak H. Structural, magnetic, and magnetocaloric properties of Fe7Se8 single crystals. Journal of Applied Physics, 124(14), 143902 (2018).

МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА И МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ СОЕДИНЕНИЯ $HO(Me_{0.84}Fe_{0.16})_2$, ГДЕ Me = Co, Ni

Аникин М.С.[1], Тарасов Е.Н.[1], Князев М.И.[1], Незнахин Д.С.[1], Зинин А.В.[1]
[1)] Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: maskim.anikin@urfu.ru

MAGNETIC PROPERTIES AND MAGNETOCALORIC EFFECT OF $Ho(Me_{0.84}Fe_{0.16})_2$ COMPOUND, WHERE Me = Co, Ni

Anikin M.S.[1], Tarasov E.N.[1], Knyazev M.I.[1], Neznakhin D.S.[1], Zinin A.V.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

For a more detailed study of the effect of the 3d sublattice on the magnetic and magnetocaloric properties of compounds $R(Co\text{-}Fe)_2$, where R = Dy, Ho, Er, with a plate-like dependence $\Delta S_m(T)$, a series of $Ho(Me_{0.84}Fe_{0.16})_2$ samples, where Me = Co, CoNi и Ni, was synthesized and studied in this paper.

Из литературы известно, что в квазибинарных соединения $R(Co\text{-}Fe)_2$, где R = Dy, Ho, Er наблюдаются платоподобные температурные зависимости параметров магнитокалорического эффекта (МКЭ), таких как изменение магнитной части энтропии (ΔS_m) и адиабатическое изменение температуры ($\Delta T_a d$) [1]. Платоподобные температурные зависимости параметров МКЭ являются суперпозицией максимумов ΔS_m при температуре Кюри (T_C) и «низкотемпературных» максимумов ΔS_m, последний возникает в результате восстановления внешним магнитным полем магнитного момента элемента R, частично разупорядоченного из-за слабого межподрешеточного обменного взаимодействия 4f-3d [2].

Позже при исследовании серии соединений $(Ho\text{-}Y)(Co_0.84Fe_0.16)_2$ было установлено, что при замещении до 40% магнитоактивного элемента Ho на «немагнитный» Y, значения ΔS_m в окрестности «низкотемпературного» максимума, наблюдаемого при температуре (T) около 100 K, остаются практически неизменными, но вдвое снижаются значения ΔS_m в T_C [1]. При этом значения T_C остаются близки к комнатной температуре. Полученное неизменное значение ΔS_m при $T \approx 100$ K даже при уменьшении доли магнитного элемента Ho объясняется ослаблением 4f-3d обменного взаимодействия, что усиливается отклик магнитной части R подрешетки на приложенное магнитное поле при $T \approx 100$ K.

С другой стороны, при замене Co на Ni в соединении $Gd(Co\text{-}Fe)_2$ происходит трансформация зависимости $\Delta S_m(T)$ от классического максимума при T_C в платоподобную зависимость при одновременном уменьшении значений T_C в два раза, что авторы так же объясняют существенным ослаблением 4f-3d обменного взаимодействия [3,4].

Для более детального рассмотрения влияния 3d подрешетки на магнитные и магнитотепловые свойства соединений $R(Co\text{-}Fe)_2$ обладающих платоподобной зависимостью $\Delta S_m(T)$, в данной работе была синтезирована серия образцов $Ho(Me_0.84Fe_0.16)_2$, где Me = Co, CoNi и Ni.

Установлено, что при замене Co на Ni линейно уменьшается параметр кристаллической решетки (a), равный 7.202, 7.192 и 7.183 Å соответственно для Me = Co, CoNi и Ni. При этом ТС снижается нелинейно, при 50% замещение Co на Ni, наблюдается сильное снижение ТС от 333 до 172 К, и далее малое изменение ТС до 161 К для 100 % замещения на Ni. Данное нелинейное изменение ТС можно связать с неравномерным замещением атомов Co на Ni, например как это наблюдалось ранее в [5]. Рассчитанные из серии кривых намагничивания температурные зависимости ΔSm, при изменении внешнего магнитного поля (ΔH) на 70 кЭ, представлена на рисунке 1. Из анализа зависимостей ΔSm(T) следует, что при замене Co на Ni, так же происходит нелинейное изменение формы зависимости ΔSm(T) в области ниже ТС. Для составов Me = Co и CoFe формы зависимостей ΔSm(T) близки, отличаются только значения ТС и максимальные значения ΔSm, а в соединении с Me = Ni резко увеличивается значение ΔSm в окрестности «низкотемпературного» максимума (при T ≈ 40 К).

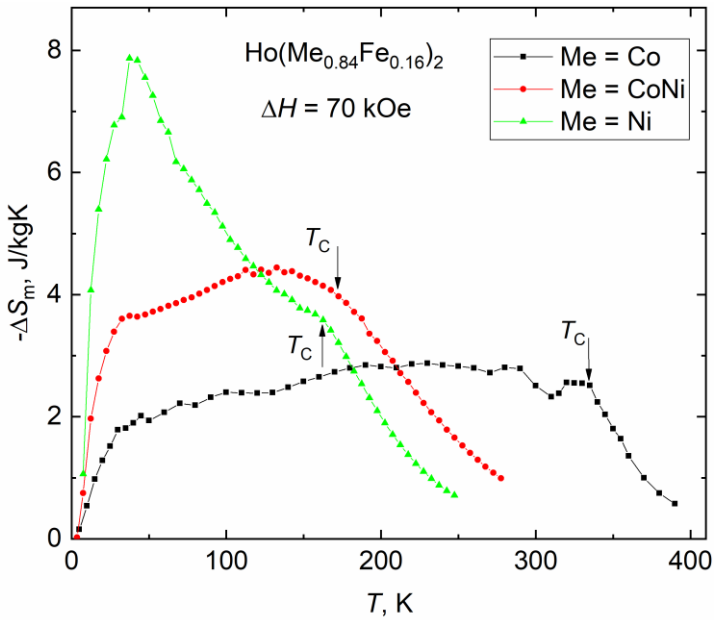


Рис. 1. Температурные зависимости ΔSm исследованных образцов при ΔH = 70 кЭ

Работа выполнена при поддержке Государственного контракта FEUZ 2023-0020 между УрФУ и Министерством высшего образования РФ

1. Аникин М.С. Тарасов Е.Н., Кудреватых Н.В., Инишев А.А., Зинин А.В. Магнитные и магнитотепловые свойства материалов на основе фаз Лавеса

R(Co1-xFex)2, с тяжелыми редкоземельными металлами // Металловедение и термическая обработка металлов, 2018г., том 758, вып. 8, с. 36-41
2. Burzo E., Pop I.G., Kozlenko D.N. Magnetic and magnetocaloric properties of some ferrimagnetic compounds // Journal of optoelectronics and advanced materials. – 2010. – V. 12. – No. 5. – PP. 1105–1113.
3. Anikin, Maksim & Tarasov, Evgeniy & Kudrevatykh, Nikolay & Zinin, Aleksander. (2018). Magnetocaloric properties of Gd(Co 1-x Fe x) 2 compounds, with x ≤ 0.60. EPJ Web of Conferences. 185. 05009. 10.1051/epjconf/201818505009.
4. Anikin, M. Magnetic and magnetocaloric properties of Gd(Ni1-xFex)2 quasi-binary Laves phases with x = 0.04 - 0.16 / M. Anikin, E. Tarasov, N. Kudrevatykh, A. Inishev, M. Semkin, A. Volegov, A. Zinin. // J. Magn. Magn. Mater. – 2018. – V. 449. – PP. 353–359.
5. M.S. Anikin, E.N. Tarasov, N.V. Kudrevatykh, D.S. Neznakhin, M.A. Semkin, N.V. Selezneva, S.V. Andreev, A.V. Zinin. Magnetic and magneto-thermal properties of ferrimagnetic alloys (Er1-xYx)(Co0.84Fe0.16)2 and their dependence on the orientations of resultant and sublattice magnetizations // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2021. – V. 33. – P. 275801. DOI: 10.1088/1361-648X/abfc17

ФОТОСТИМУЛИРОВАННАЯ ЭЛЕКТРОННАЯ ЭМИССИЯ В ПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЯХ ДИОКСИДОВ КРЕМНИЯ И ГЕРМАНИЯ

Бунтов Е.А.[1], Кочаков Я.А.[1], Зацепин А.Ф.[1]
[1)] Физико-технологический институт, Уральский Федеральный Университет, Екатеринбург, Россия
E-mail: yaroslav_04.08.01@mail.ru

OPTICALLY STIMULATED ELECTRON EMISSION IN SURFACE LAYERS OF SILICON AND GERMANIUM OXIDES (GeO_2)

Buntov E.A.[1], Kochakov Y.A.[1], Zatsepin A.F.[1]
[1)] Institute of Physics and Technology, Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia

The OSEE is a highly sensitive method for studying structural defects and excited electronic states in the surface layers of solids. The aim of this work is to analyze the structure of the surface layer of silicon oxide and germanium oxide samples by studying the measured OSEE spectra.

Фотостимулированная электронная эмиссия (ФСЭЭ) — это метод исследования электронных свойств твердых тел, основанный на регистрации электронной эмиссии из поверхностных слоев материала, возбужденного оптическим излучением. ФСЭЭ имеет высокую чувствительность к различным нарушениям атомной и электронной структуры, и может использоваться для изучения структурных дефектов и возбужденных электронных состояний в поверхностных слоях твердых тел.

Целью данной работы является анализ структуры поверхностного слоя образцов оксида кремния (SiO_2) и оксида германия (GeO_2) посредством изучения измеренных спектров ФСЭЭ.

Измерения спектров ФСЭЭ проводились на дефектоскопе АСЭД-1. С помощью данного оборудования в вакууме образцы SiO_2 и GeO_2 подвергались возбуждению посредством монохроматического оптического излучения. При сканировании монохроматора в диапазоне 200–500 нм, регистрировались спектры образцов. Далее поверхности образцов облучались рентгеновским излучением, после чего проводилась повторная регистрация спектров. Облучение приводит к незначительному смещению пиков спектров в область низких частот, а также к увеличению общей интенсивности излучения на всем диапазоне.

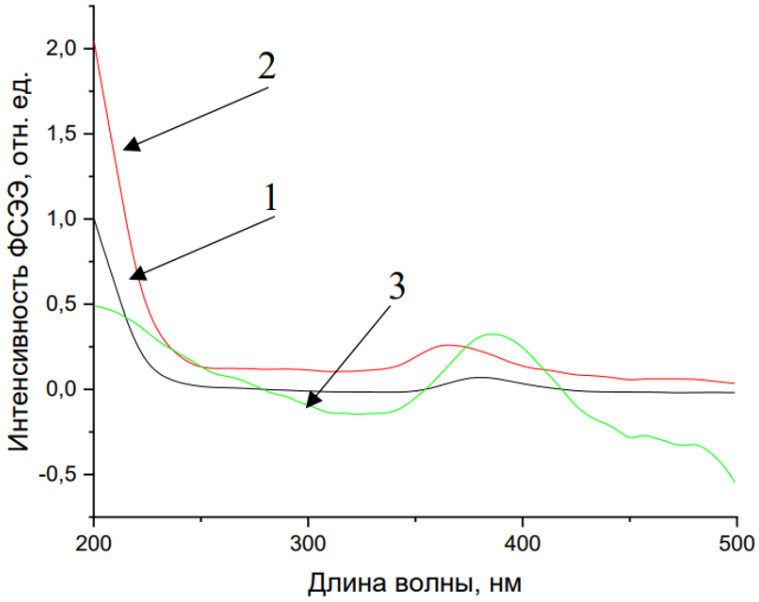


Рис. 1. Спектр ФСЭЭ облученного оксида кремния SiO_2 с флюенсом $5*10^{16}$ $см^{-2}$ имплантированных ионов цинка Zn+ (1 – сглаженный спектр оксида кремния, 2 – сглаженный спектр фона, 3 – результат деления спектр образца/фоновый спектр)

1. Zatsepin A.F., Biryukov D.Y., Kortov V.S. Photoelectron spectroscopy of E′ centers in crystalline and glassy silicon dioxide // Phys. Solid State. 2006. Vol. 48, № 2. P. 245–254.

ВЛИЯНИЕ СТЕПЕНИ ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИИ НА ПРОВОДИМОСТЬ УНТ

Колпаков П.А.[1], Капустин С.Н.[1]
[1)] Россия, г. Архангельск, Северный Арктический федеральный университет имени М. В. Ломоносова
E-mail: kolpakovpasha@yandex.ru

THE EFFECT OF THE DEGREE OF FUNCTIONALIZATION ON THE CONDUCTIVITY OF CNTS

Kolpakov P.A[1], Kapustin S.N.[1]
[1)] Russia, Arkhangelsk, Northern Arctic Federal University named after M. V. Lomonosov

In our work, we investigate the dependence of the electrophysical properties of CNTs depending on the degree of their functionalization. These data will allow to obtain CNTs with a given conductivity.

Проводимость углеродных нанотрубок (УНТ), зависит от их хиральности и количества дефектов [1]. Однако задать эти параметры при производстве довольно сложно. Это мешает раскрыть их потенциал к широкому применению. В нашей работе мы исследуем зависимость электрофизических свойств УНТ, в зависимости от степени их функционализации. Химический способ позволяет получить сравнительно простым методом УНТ с прогнозируемой проводимостью [2].

Измерялись УНТ Таунит-М и Таунит-МД с функциональными группами: -OH, -COOH и -CONH2 с различной степенью функционализации. которая определяется временем реакции. Первым методом измерения проводимости было выбрано построение зависимости проводимости образцов от температуры (-195,79 °C─100°C) и частоты (1Гц─1МГц) на приборе Новоконтрол-80. Предварительно запрессовав навеску 0,3г в цилиндр диаметром 12мм. Вторым методом выбран четырёхэлектродный метод определения поверхностного сопротивления УНТ-лент, описанный в ГОСТ IEC/TS 62607-2-1-2017.

В ходе исследования было выявлено, что зависимость проводимости от частоты проходящего тока малозначительная. С зависимостью проводимости от температуры ситуация обратная. Исследование показало весомое нелинейное отклонение значений проводимости от температуры со спадом в районах низких и высоких температур, а также характерного пика для образцов УНТ-CONH2 и УНТ-COOH. Для УНТ-OH зависимость от температуры несущественная.

В рамках доклада будут представлены детальные графики зависимостей проводимости УНТ Таунит-М и Таунит-МД, функционализированных с различной степенью.

1. Елецкий, А. В. Углеродные нанотрубки / Успехи физических наук. – (1997). – Т. 167.
2. Капустин, С. Н. Зависимость проводимости углеродных нанотрубок от степени их функционализации / Физический вестник ВШЕНиТ САФУ. – (2017). – № 17.
3. Ларионов С. А., Деев И. С., Петрова Г. Н., Бейдер Э. Я. / Влияние углеродных наполнителей на электрофизические, механические и реологические свойства полиэтилена / Труды ВИАМ. – (2013). – №9.

ЭФФЕКТ ОБМЕННОГО СМЕЩЕНИЯ В ФЕРРИМАГНЕТИКЕ Fe_2CrSe_4

Комарова В.А.[1], Мозговых С.Н.[1], Шерокалова Е.М.[1], Селезнева Н.В.[1], Баранов Н.В.[1, 2]

[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, ИЕНиМ, г. Екатеринбург, Россия

[2)] Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: v.a.komarova@urfu.me

EXCHANGE BIAS EFFECT IN FERRIMAGNETIC COMPOUND Fe_2CrSe_4

Komarova V.A.[1], Mozgovyh S.N.[1], Sherokalova E.M.[1], Selezneva N.V.[1], Baranov N.V.[1, 2]

[1)] Ural Federal University, Institute of Natural Sciences and Mathematics, Ekaterinburg, Russia

[2)] M.N. Mikheev Institute of Metal Physics of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russia

The structure and physical properties of the compound Fe_2CrSe_4 are analyzed. It is ferrimagnetic below $T_N \sim 300$ K with compensation point $T \sim 136$ K. It has been found that this compound exhibits the exchange bias effect, which is escribed to the presence of two magnetic phases.

Fe_3Se_4 - слоистое соединение со структурой типа NiAs (пространственная группа I2/m) и с ферримагнитным упорядочением ниже 320 К [1]. Магнитные моменты атомов Fe, расположенных в одном слое ориентированы параллельно друг другу, а соседних слоях противоположно направлены, что из-за наличия вакансий в каждом втором катионном слое приводит к существованию результирующей намагниченности. Изоструктурное соединение Cr_3Se_4 проявляет антиферромагнитное поведение ниже 160 К [2]. Замещение атомов железа на хром $Fe_{3-x}Cr_xSe_4$ приводит к кардинальному изменению физических свойств и магнитного поведения соединений [3]. Целью исследования является установление природы магнитного состояния в соединении Fe_2CrSe_4, в котором атомы железа частично замещены хромом.

Соединение было получено методом твердофазного синтеза при температуре 800°С. Кристаллическая структура исследована с помощью рентгеноструктурного анализа (дифрактометр Bruker D8 Advance). Измерения намагниченности проводились в интервале температур от 2 К до 350 К в полях до 70 кЭ с помощью PPMS DynaCool system from Quantum Design.

Установлено, что полученное соединение Fe_2CrSe_4 является однофазным, кристаллизуется в пространственной группе I2/m. Рассчитанные параметры

решетки согласуются с литературными данными [4]. Измерения температурных и полевых зависимостей намагниченности показали, что соединение Fe_2CrSe_4 ниже температуры T_N ~ 300 К. проявляет ферримагнитное поведение с характерной для ферримагнетиков точкой компенсации намагниченности подрешеток при T_c ~ 136 К. Полевая зависимость намагниченности при данной температуре является линейной, что характерно для антиферромагнитного расположения магнитных моментов. Выше и ниже температуры компенсации выявлены пики коэрцитивной силы; кроме того, при температурах ниже 50 К выявлено значительное смещение петель гистерезиса, которое возрастает при понижении температуры и достигает 6.6 кЭ при температуре 2 К. Эффект обменного смещения в соединении Fe_2CrSe_4, по-видимому, связан с существованием областей (кластеров) с ближним магнитным порядком в ферримагнитной матрице. Наличие таких кластеров может быть обусловлено неоднородным распределением замещающих атомов хрома в катионных слоях.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 22-13-00158).

1. Andresen A. F. A Neutron Diffraction Investigation of Fe3Se4 //Acta Chem. Scand. – 1968. – Т. 22. – №. 3. – С. 8. https://doi.org/10.3891/acta.chem.scand.22-0827
2. Wintenberger M., André G., Hammann J. Composition and temperature dependent magnetic structures of monoclinic chromium selenides Cr3±xSe4, x≤ 0.2 //Journal of magnetism and magnetic materials. – 1995. – Т. 147. – №. 1-2. – С. 167-176. https://doi.org/10.1016/0304-8853(94)01663-1
3. Snyder G. J., Caillat T., Fleurial J. P. Thermoelectric, transport, and magnetic properties of the polaron semiconductor Fe x Cr 3− x Se 4 //Physical Review B. – 2000. – Т. 62. – №. 15. – С. 10185. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.62.10185
4. Lambert-Andron B., Berodias G., Babot D. Structures magnétiques des composes MFe2Se4 (M= Ti, V, Cr, Fe, Co, Ni) //Journal of Physics and Chemistry of Solids. – 1972. – Т. 33. – №. 1. – С. 87-94. https://doi.org/10.1016/S0022-3697(72)80057-X

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И ДЕФЕКТОВ ГРАФЕНА ПРИ ПЕРЕНОСЕ НА ПОВЕРХНОСТИ РАЗЛИЧНОГО РЕЛЬЕФА

Комлина С.В.[1]
[1)] Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН
E-mail: s.komlina@g.nsu.ru

INVESTIGATION STRUCTURE AND DEFECTS OF GRAPHENE DURING TRANSFER ON THE SURFACES OF VARIOUS TERRAIN

Komlina S.V.[1]
[1)] S. S. Kutateladze Institute of Thermophysics SB RAS

Analysis of the Raman spectra of graphene transferred to various substrates showed that with increasing roughness of the substrate, the D-line associated with defects increases significantly, which indicates discontinuities in the graphene layer when transferred to non-atomically smooth surfaces.

Графен – это двумерный слой sp^2-гибридизованных атомов углерода. Интерес к исследованию графена обусловлен его исключительными электронными, химическими, тепловыми, механическими и оптическими свойствами, благодаря которым этот материал является очень перспективным для применения во многих отраслях. Для полного раскрытия потенциала применимости графена необходимо более детальное изучение всех его свойств и структуры при различных условиях получения.

Данная работа призвана дать оценку целостности графена после переноса его на образцы различного рельефа, что позволит расширить представления о поведении монослоя углерода при нанесении на необходимые поверхности. Синтез графена производился методом химического парофазного осаждения метана на медной основе, после чего подложки растворяли в растворе персульфата аммония и переносили свободно плавающие на поверхности воды графеновые плёнки на интересующие образцы. В качестве подложек, на которые осуществлялся перенос, использовались пластины кремния с естественным и искусственно созданным оксидным слоем, а также текстурированные (характерный размер шероховатости - 6 нм) поверхности на основе кремния и меди, полученные с помощью обработки образцов наносекундными лазерными импульсами и обладающие супергидрофильными и супергидрофобными свойствами.

Спектроскопия комбинационного рассеяния света (КР) исторически играла важную роль в характеристике структуры графитовых материалов, позволяя получать ценную информацию о количестве слоёв и дефектности исследуемого углеродного слоя [1]. Главными преимуществами данного метода являются бесконтактность (на образец воздействует только свет) и большой объём получаемой информации. В спектре графена наблюдаются следующие

характерные линии: D (1350 cm^{-1}), G (1587 cm^{-1}), 2D (1680 cm^{-1}), – по интенсивности, форме и положению которых оценивается его качество. В работе проведен анализ КР спектров графена, перенесенного на различные подложки, показано, что с увеличением шероховатости подложки существенно растет D линия, связанная с дефектами в графитовом слое, что свидетельствует о разрывах в графеновом слое при переносе на не атомарно гладкие поверхности.

1. M.A. Pimenta, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus, L.G. Cançado, A. Jorio, R. Saito, Physical Chemistry Chemical Physics, 9, 1276–1291, (2007)

ПОДХОДЫ К ПРОЕКТИРОВАНИЮ МАГНИТНЫХ СИСТЕМ, ИЗГОТАВЛИВАЕМЫМ МЕТОДОМ СЕЛЕКТИВНОГО ЛАЗЕРНОГО ПЛАВЛЕНИЯ

Корчигин К.А.[1], Волегов А.С.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина, Институт естественных наук и математики
E-mail: darvin10188@mail.ru

APPROACHES TO THE DESIGN OF MAGNETIC SYSTEMS MANUFACTURED BY SELECTIVE LASER SINTERING

Korchigin K.A.[1], Volegov A.S.[1]
[1)] Ural Federal University, Institute of Natural Sciences and Mathematics

Creation of approaches for the practical application of permanent magnets with arbitrary orientation of easy magnetisation axes and magnetic systems based on them produced by selective laser sintering (SLS).

Постоянные магниты и магнитные системы на их основе являются неотъемлемой частью современных технических устройств. Они необходимы как для сложных высокоточных средств измерений, так и для электронных устройств окружающих нас ежедневно, например, телефонов, счётчиков, электрических генераторы и др. В основном системы с постоянными магнитами используют для преобразования механической энергии в электрическую, электрической энергии в механическую и для создания стационарных магнитных полей определенных конфигураций. Производятся постоянные магниты из магнитотвёрдых материалов. Наиболее примечательными из них являются материалы на основе Nd-Fe-B. Их характерными чертами являются коэрцитивная сила H_c, достигающая 27 кЭ, а также высокая остаточная индукция $B_r \approx 14$ кГс. Такие характеристики позволяют создавать магнитные системы на основе постоянных магнитов, долгое время не требующих повторного намагничивания.

Существующие методы производства магнитов позволяют получать либо изотропные постоянные магниты, либо магниты с одноосной магнитной текстурой. Для создания постоянных магнитных систем сложной формы с произвольной ориентацией осей лёгкого намагничивания начинают использоваться технологии аддитивного производства [1]. Это позволяет создавать постоянные магниты не только с произвольной ориентацией осей лёгкого намагничивания, но и произвольного размера, что, потенциально, позволит произвести оптимизацию конструкций и уменьшение характерных размеров многих устройств. Однако, несмотря на перспективы использования, на данный момент отсутствует опыт применения подобных магнитов на практике. Целью настоящей работы является создание подходов к применению постоянных

магнитов со сложным распределением магнитной текстуры в них в составе магнитных систем.

Разработка подходов начинается с создания моделей магнитов со сложным распределением намагниченности и расчёта магнитных полей вокруг них, а также оценки энергетических и силовых взаимодействий с внешними магнитными полями посредством программной среды COMSOL multiphysics. Для расчёта моделей в COMSOL используется метод конечных элементов, при котором исследуемая непрерывная модель разбивается на конечное количество элементов. Метод используется для численного решения дифференциальных уравнений в частных производных, которыми и описываются рассматриваемые нами физические явления. Точность полученных нами результатов будет зависеть главным образом от размеров задаваемой нами сетки конечных элементов.

В докладе будут представлены распределения магнитных полей в пространстве в магнитных системах различных конфигураций, графики зависимости индукции магнитного поля в зависимости от характеристик сложной магнитной системы, сравнение характеристик полей, создаваемых постоянными магнитами со сложным распределением магнитной текстуры, с таковыми, создаваемыми магнитными системами, собранными из нескольких изотропных магнитов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №21-72-10104)

1. Volegov A.S. et. al., Acta Materialia, 188, 733-739 (2020)

ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННОГО ТРАНСПОРТА И МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ СПЛАВА Mn_3Al В ЛИТОМ И БЫСТРОЗАКАЛЕННОМ СОСТОЯНИИ

Коренистов П.С.[1], Ирхин В.Ю.[1], Семянникова А.А.[1], Марченкова Е.Б.[1], Марченков В. В.[1, 2]

[1)] Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, 620108 Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18

[2)] Уральский федеральный университет, 620002 Екатеринбург, ул. Мира, 19

E-mail: korenistov@imp.uran.ru

FEATURES OF ELECTRONIC TRANSPORT AND MAGNETIC PROPERTIES OF Mn_3Al ALLOY IN CAST AND RAPID MELT QUENCHED STATE

Korenistov P.S.[1], Irkhin V.Yu.[1], Semyannikova A. A.[1], Marchenkova E.B.[1], Marchenkov V. V.[1, 2]

[1)] M.N. Mikheev Institute of Metal Physics, 620108, S. Kovalevskaya str., 18, Ekaterinburg, Russia

[2)] Ural Federal University, 620002, Mira str., 19, Ekaterinburg, Russia

The investigate was carried out to study the effect of rapid melt quenched on electronic transport and magnetic properties in the Mn_3Al Heusler alloy. A significant change in the properties of intermetallic depending on its structural state was found.

Интерметаллические соединения Mn_3X (X = Al, Ga, Ge, Sn и др.) занимают особое место среди многочисленного семейства соединений Гейслера, так как в них могут быть реализованы состояния антиферромагнетика, скомпенсированного ферримагнетика, топологического полуметалла и фрустрированного магнетика [1-4]. С помощью магнитного и электрического поля, давления и температуры можно осуществлять «настройку» их электронной зонной структуры, а, следовательно, влиять на их транспортные и магнитные свойства.

Известно, что структура интерметаллических соединений может сильно зависеть от способов приготовления сплавов (литые, подвергнутые быстрой закалке из расплава и термобарической обработке, наноструктурированные и т.п.), что неизбежно отразится в их электронном и магнитном состоянии. Поэтому изучение роли структурного состояния в формировании и поведении электронных и магнитных характеристик интерметаллических соединений на основе марганца также представляется достаточно важной и интересной задачей. Цель данной работы - изучение особенностей структуры, электрических и магнитных свойств соединения Гейслера Mn_3Al в литом и быстрозакаленном состоянии.

Объемный поликристаллический сплав Mn_3Al был синтезирован в индукционной печи в атмосфере очищенного аргона. Приготовленный слиток отжигали в течение 72 ч при 650°C в атмосфере аргона с последующим охлаждением до комнатной температуры со скоростью ~100 град/ч. Быстрозакаленные ленты Mn3Al были получены из объемного соединения методом быстрой закалки из расплава (БЗР) при комнатной температуре под давлением 0.28 атм в атмосфере очищенного аргона и скорости охлаждения ~ 104-105 град/сек. Аттестация сплавов и измерение их характеристик выполнены в Центре коллективного пользования «Испытательный центр нанотехнологий и перспективных материалов».

В результате проведенных исследований было установлено, что БЗР соединения Mn_3Al приводит к изменению его микроструктуры, что сильно сказывается на электронных транспортных и магнитных свойствах.

Для литого сплава характерны крупные неравноосные по форме зерна шириной от 50 мкм и длиной до 200 мкм, с выделением второй фазы MnS (~1%) по границам зерна. Напротив, зерна практически равноосные со средним размером ~ 10 мкм в случае быстрозакаленного сплава. Здесь выделения на границах зерен отсутствуют, а их химический состав более однороден.

БЗР приводит к уменьшению величины остаточного сопротивления более чем на один порядок; вид температурных зависимостей электросопротивления изменяется с полупроводникового на металлический; величина намагниченности намного уменьшается, а вид ее полевых зависимостей изменяется с линейного на монотонный с тенденцией к насыщению; кроме нормальной составляющей эффекта Холла возникает аномальный вклад.

Исследования выполнены за счет гранта Российского научного фонда (22-22-00935).

1. Gavrikov I., Seredina M., Zheleznyy M., et al. Magnetic and transport properties of Mn2FeAl // J. Magn. Magn. Mater. 2019. V. 478. P. 55.
2. Dash S., Lukoyanov A.V., Nancy, et al. Structural stability and magnetic properties of Mn2FeAl alloy with a β-Mn structure // J. Magn. Magn. Mater. 2020. V. 513. P. 167205.
3. Irkhin V.Yu., Skryabin Yu.N. Two-band model and RVB-type states: Application to Kondo lattices, pyrochlores and Mn-based systems // Physica B. 2022. V. 633. P. 413780.
4. Jamer M.E., Wang Y.J., Stephen G.M. et al. Compensated Ferrimagnetism in the Zero-Moment Heusler Alloy Mn3Al // Phys. Rev. Appl. 2017. V. 7. P. 064036.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЧИСЛА НЕНУЛЕВЫХ ОБМЕННЫХ ПАРАМЕТРОВ МОДЕЛИ НА ОСНОВЕ ЕЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ НАБЛЮДАЕМЫХ

Козлов Е. И.[1], Яковлев И. А.[1], Мазуренко В. В.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
E-mail: i3gorfit@yandex.ru

DETERMINATION OF THE NUMBER OF NON-ZERO EXCHANGE PARAMETERS OF THE MODEL BASED ON ITS THERMODYNAMIC OBSERVABLES

Kozlov E. I.[1], Iakovlev I. A.[1], Mazurenko V. V.[1]
[1)] Ural Federal University named after the First President of Russia B. N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia

In our work, we studied the behavior of thermodynamic observables of a ferromagnetic system and showed that using them it is possible to determine the number of non-zero exchange parameters of the model.

Одним из важнейших направлений современной физики является изучение новых материалов и их свойств. В частности, в ферромагнетиках важным является определение вида обменных функций магнитных гамильтонианов. Данный вопрос представляет собой трудоемкую аналитическую задачу, которая сводится к большим расчетам. В нашей работе предлагается использовать термодинамические наблюдаемые системы для определения числа ненулевых обменных параметров.

Было рассмотрено поведение двумерных ферромагнитных структур с различной величиной и числом обменов. Моделирование проводилось методом Монте-Карло [1] при помощи программного комплекса UppASD [2] для дискретной решетки 20x20 с периодическими граничными условиями. Гамильтониан системы содержал в себе только одно слагаемое, представляющее собой гамильтониан модели Гейзенберга [3].

Одной из экспериментально доступных наблюдаемых является теплоемкость вещества, с помощью которой возможен расчет дисперсии энергии. В работе было показано, что наклон графика дисперсии энергии является величиной, обладающей необходимыми свойствами. В результате анализа поведения данного параметра было определено следующее: вышеописанная наблюдаемая позволяет отличать системы с разным числом обменов, вносящих весомый вклад в общий обмен (при этом определено, что весомым является величина равная 10-13% от суммарного значения), системы с различным модулем суммарного обмена и системы с его различным разбиением при сохраняющемся суммарном значении, что показано на рисунке.

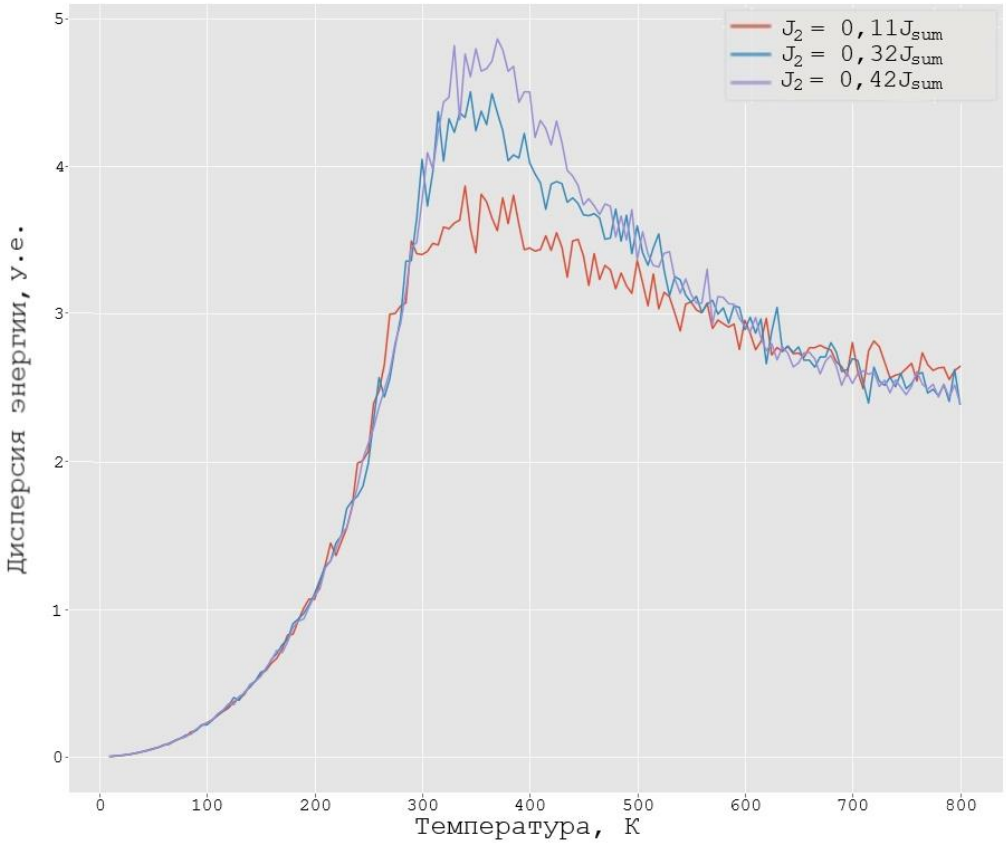


Рис. 1. Зависимости дисперсии энергии от температуры для системы с взаимодействиями в пределах двух координационных сфер. Кривые соответствуют различному разбиению суммарного обмена между сферами.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 21-72-10136.

1. D. P. Landau and K. Binder. A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics, Second Edition. Cambridge University Press (2000).
2. Eriksson O., Bergman A., Bergqvist L., Hellsvik J., Atomistic Spin Dynamics: Foundations and Applications, Oxford University Press (2017).
3. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М., «Квантовая механика (нерелятивистская теория)», Физматлит (2002)

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКАЯ СТАБИЛЬНОСТЬ СИСТЕМЫ GaFeAs

Крюков Р.Н.[1], Кудрин А.В.[1], Зубков С.Ю.[1]
[1)] Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского; ННГУ им. Н.И. Лобачевского
E-mail: kriukov.ruslan@yandex.ru

THERMODYNAMIC STABILITY OF THE GaFeAs SYSTEM

Kriukov R.N.[1], Kudrin A.V.[1], Zubkov S.Yu.[1]
[1)] National Research Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod

Using the self-consistent field theory implemented in the Quantum Espresso program, concentration intervals of stable (Fe concentration over 65 at.%), unstable (less than 35 at.%), and metastable (35–65 at.%) states of the GaFeAs system at temperatures of 100–1000 K were established.

Одной из проблем полупроводниковой инженерии является термодинамическая нестабильность, вызванная избыточностью свободной энергии системы [1]. Это приводит к расслоению системы, выделению второй фазы в виде кластеров в объеме материала [2]. Эта проблема является одной из главных при проектировании разбавленных магнитных полупроводников на основе A^3B^5 (GaFeAs [3]), формируемых при температурах 400 – 500 К [3]. По этой причине существует задача поиска условий роста и постростовой обработки, при которых слои будут однородными и проявлять стабильные магнитные и электрические свойства.

На первых этапах исследований было проведено моделирование системы GaFeAs с использованием программного пакета Quantum Espresso [4] с использованием теории самосогласованного поля. На примере суперячейки, содержащей 64 атома, производились вычисления полной энергии растворов при различном содержании атомов Fe в решетке полупроводника GaAs. При вычислениях осуществлялось одновременное замещение в узлах Ga и As атомами Fe. Это обосновано тем, что при формировании раствора существует равная вероятность замещения [3]. Это выполнялось для полупроводника GaAs, имеющего тип решетки сфалерита и вюрцита. После получения этой информации с использованием модели расчета из [1] были получены концентрационные зависимости свободной энергии Гиббса для решеток вюрцита (G_v), сфалерита (G_s) и их комбинации (G_{s+v}). Последнее рассматривалось так как, согласно [3], система GaFeAs может пребывать в состоянии, в котором вюрцитный и сфалеритный типы решеток сосуществуют в определенных соотношениях. Эти данные позволили установить интервалы концентраций, при которых система является стабильной, метастабильной и нестабильной.

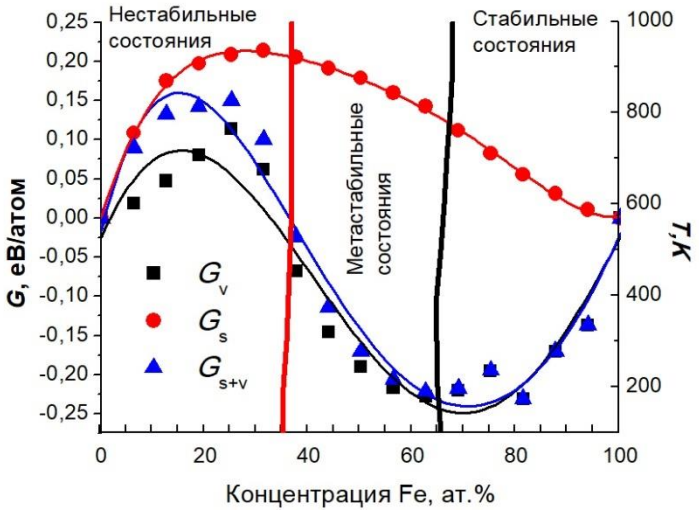


Рис. 1. Концентрационная зависимость свободной энергии раствора GaFeAs от количества Fe для разных типов решетки (при температуре 473 К). На рисунке отмечены границы метастабильных, стабильных и нестабильных состояний системы GaFeAs при температуре 100 – 1000 К (сфалерит и вюрцит).

Согласно результатам моделирования, наблюдаются широкие концентрационные интервалы стабильности (количество Fe 65 ат.% и более) и метастабильности (количество Fe от 35 до 65 ат.%). Иными словами, в GaAs возможно растворить 35 ат. % и более. Этот факт объясняет результаты, описанные в [3]. Отсутствие минимумов на зависимости (G_s) указывает на то, что GaFeAs при температуре менее 500 К не может существовать в стабильном состоянии при любом количестве Fe.

Работа была выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ МК-265.2022.1.2.

1. Урусов В.С. Теория изоморфной смесимости, Москва: Наука (1977).
2. Вавилова Л.С., Капитонов В.А., Мурашова А.В., Н.А. Пихтин, Тарасов И.С., Ипатова И.П., Щукин В.А., Берт Н.А., Ситникова А.А., ФТП, 33 (9), 1108 (1999).
3. Кудрин А.В. Ферромагнитные полупроводниковые структуры на основе слоев AIIIB V , легированных атомами Mn и Fe (докторская диссертация), Нижний Новгород (2022).
4. Quantum Espresso. – URL: https://www.quantum-espresso.org/// (дата обращения 22.01.2023).

ПОВЫШЕНИЕ СХОДИМОСТИ МЕТОДА МОНТЕ-КАРЛО ДЛЯ МОДЕЛИ ИЗИНГА ПРИ ПОМОЩИ PEDD

Кукушкин Д.Е.[1], Кашин И.В.[1]
[1)] Уральский федеральный университет
E-mail: BlackDEK546@yandex.ru

IMPROVING CONVERGENCE OF THE MONTE CARLO METHOD FOR THE ISING MODEL USING PEDD

Kukushkin D.E.[1], Kashin I.V.[1]
[1)] Ural Federal University

The purpose of this work is to modernize the Monte Carlo algorithm for the Ising model, using the algorithm PEDD[1], to more effectively find the ground state of the system.

Численное моделирование физических систем различных типов и масштабов является важной часть теоретической физики. Одним из метода исследования физических систем является алгоритм Монте-Карло. Принцип работы можно описать так. На каждом этапе итерации Монте-Карло, существует текущая конфигурация параметров, которую мы можем обновить или не обновить. На основе текущей строиться конфигурация близкая к исходной и рассчитывается значение целевой функции. Вероятность принятие новой конфигурации зависит от функции:

$p(\Delta E) = \{$
если $\Delta E <= 0$, 1,
если $\Delta E > 0$, $\exp(-\Delta E \cdot T)$,
$\}$

где ΔE — это дельта между новой и старой целевой функцией. T - температура.

Видно, что рост температуры приближает вероятность перехода к единице. При высокой температуре режим приближается к нормальному. Нормальное распределение характеризуется своей конечностью, что ограничивает метод Монте-Карло. Данную проблему можно проиллюстрировать на примере эксперимента с блужданием по пространству Гауссовых ям.

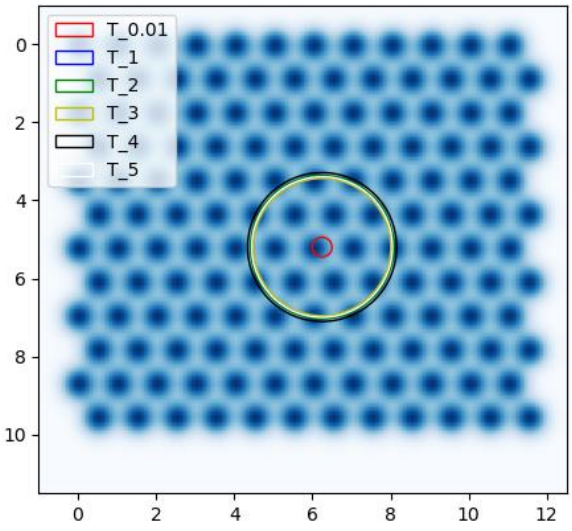


Рис. 1. Зависимость среднего расстояния от температуры в МК. Температура выражена в относительных единицах.

Цель данной работы, модифицировать метод Монте-Карло, чтобы в режиме высокой температуры актуальные перемещения происходили равномерно по всему конфигурационному пространству. Для этого мы применяем алгоритм по асимптотическому непрерывному восстановлению заранее заданного распределения или PEDD, изобретенного Ильей Владимировичем Кашиным в работе [1]. В данной работе он применяется в модифицированном варианте. Распределение восстанавливается не на оптимизируемой функции, а на функции зависимой от оптимизируемой, такую функции мы будем называть «зависимой». Таким образом мы показываем, что восстанавливаемое равномерное распределение этой характеристики, влечет за собой более широкий охват области поиска, нежели это реализуется в стандартной версии Монте-Карло с отжигом. Схема была апробирована на модели Изинга состоящая из 200 спинов с 6 возможными проекциями и 3 обменными взаимодействиями, между соседями, через соседа, через двух соседей.

1. I. V. Kashin, Predetermined equilibrium driven dynamics, AIP Conference Proceedings 2313, 030048 (2020)

ПРИМЕНЕНИЕ ПОЗИТРОННОЙ АННИГИЛЯЦИННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ДЛЯ АНАЛИЗА ДЕФЕКТОВ В СИНТЕТИЧЕСКИХ АЛМАЗНЫХ ПЛАСТИНАХ

Кузив И.В.[1]
[1)] Северный (Арктический) федеральный университет имени М.В. Ломоносова, г. Архангельск, Россия.
E-mail: i-kuziv@yandex.ru

APPLICATION OF POSITRON ANNIHILATION SPECTROSCOPY FOR ANALYSIS OF DEFECTS IN SYNTHETIC DIAMOND PLATES

Kuziv I.V.[1]
[1)] Northern (Arctic) Federal University named after M.V. Lomonosov

In this work, the specimens of electron-irradiated synthetic diamond plates were investigated. The analysis of crystal lattice defects in specimens was performed using Positron Annihilation Spectroscopy. The type and distributions of defects over the depth of specimens are determined.

Проведены исследования дефектов в синтетических алмазных пластинах, выращенных по технологии HTHP методом температурного градиента. Исследовалась серия алмазных пластин размерами 3x3x1,5 мм. Для образования дефектов образцы были подвержены облучению электронами.

В качестве инструмента для анализа дефектов использовалась позитронная аннигиляционная спектроскопия (ПАС). ПАС способна обнаружить такие дефекты как вакансии, кластеры вакансий, дислокации и т.д., а также определить глубинный профиль распределения дефектов. ПАС была реализована двумя методами: методом измерения времени жизни позитронов и методом допплеровского уширения аннигиляционной линии [1].

Первая часть эксперимента состояла в подготовке и облучении электронами (10 МэВ, 10^16/см^2; 3 МэВ, 10^18/см^2) образцов. Во второй части эксперимента образцы были исследованы методами ПАС. Исследование допплеровского уширения аннигиляционной линии проводилось на пучке позитронов с энергией позитронов до 26 кэВ [2].

В результате эксперимента были получены данные по времени жизни позитронов в образцах, зависимость S параметра от энергии пучка позитронов. Данные были исследованы с помощью программы VEPFIT [3].

В ходе доклада будут подробно рассмотрены полученные данные.

1. K. Siemek, M.K. Eseev, P. Horodek, A.G. Kobets, I.V. Kuziv, Applied Surface Science, 546, 149107 (2021).
2. P. Horodek, A. G. Kobets, I. N. Meshkov, A.A. Sidorin and O.S. Orlov, Nukleonika 60, Iss. 4, 725-728 (2015).

3. A. Van Veen, H. Schut, M. Clement, J.M.M. de Nijs, A. Kruseman, M.R. Ijpma, Applied Surface Science, 85, 216-224 (1995).

ДИАГНОСТИКА ТЕПЛОПРОВОДЯЩИХ СВОЙСТВ ПЕРКОЛЯЦИОННЫХ СЕТЕЙ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК С РАЗЛИЧНЫМИ ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИЯМИ

Логинова А.С.[1], Капустин С.Н.[1]
[1)] Северный (Арктический) федеральный университет имени М.В. Ломоносова г. Архангельск, Россия
E-mail: loginova.a.s@edu.narfu.ru

DIAGNOSTICS OF HEAT-CONDUCTING PROPERTIES OF PERCOLATION NETWORKS OF CARBON NANOTUBES WITH VARIOUS FUNCTIONALIZATIONS

Loginova A.S.[1], Kapustin S.N.[1]
[1)] Northern Arctic Federal University named after M.V. Lomonosov, Arkhangelsk, Russia

This article considers the dependence of the thermal conductivity of M and MD type CNTs on the type and degree of functionalization.

Углеродные нанотрубки сравнительно недавний объект исследований и комплексная диагностика свойств их не проведена на данный момент. Однако, известно, что УНТ планируют использовать для добавления в композиты, в качестве армирующей или функциональной добавки. При этом очень часто УНТ подвергают химической обработке, прививают им функциональные группы. Прививка радикалов изменяет все свойства УНТ одновременно - электрофизические, теплопроводность, сорбционные, адгезионные.

Как было предложено [1], одним из способов улучшить теплопроводность перколяционной сети УНТ без наращивания концентрации УНТ - является функционализация УНТ. Для удостоверения были проведены измерения на теплопроводность с углеродными нанообектами. Для измерения было выбрано 4 вида УНТ: Таунит-МД (15 минут функционализации в азотной кислоте), Таунит-МД (3 часа функционализации в азотной кислоте), Таунит-МД (неочищенные), Таунит-МД (очищенный от аморфного углерода и металлов).

Полученные результаты объясняются следующим образом. После очистки наноматериала от аморфного углерода и частиц катализатора наблюдается небольшое падение теплопроводности. Аморфный углерод заполняет промежутки между УНТ, а металлические включения способствуют транспорту фононов и электронной теплопроводности. Небольшой уровень функционализации поднимает теплопроводность на 0.06 Вт, а среднесрочная функционализация – COOH группами увеличивает теплопроводность практический в двое.

В ходе доклада будут представлены УНТ «Таунит-М» с такие функциональные группами, как: – OH, -COOH, -NH2, -CONH2. Полученные

данные могут применяться для модификации термопаст, тепловых аккумуляторов, сверхгидрофобных покрытий и т.д.

1. Richard Gulotty, Micaela Castellino, Pravin Jagdale, Alberto Tagliaferro, and Alexander A. Balandin. Effects of Functionalization on Thermal Properties of Single-Wall and Multi-Wall Carbon Nanotube–Polymer Nanocomposites. American Chemical Society. 5114–5121 (2013)

КРОССОВЕР МАГНИТНОГО И ЭЛЕКТРОННОГО ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В ФЕРРОМАГНИТНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Лопатко Э.И.[1], Повзнер А.А.[1], Волков А.Г.[1], Зайцева Н.А.[1], Ноговицына Т.А.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, 2023 г.
E-mail: e.i.lopatko@urfu.ru

CROSSOVER OF MAGNETIC AND ELECTRONIC PHASE TRANSITIONS IN FERROMAGNETIC SEMICONDUCTORS

Lopatko E.I.[1], Povzner A.A.[1], Volkov A.G.[1], Zaiceva N.A.[1], Nogovitsyna T.A.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, 2023.

Using the example of La1–xCaxMnO3, it is shown that the inclusion of electric and magnetic fields during a first-order phase transition in ferromagnetic semiconductors is accompanied by the appearance of self-oscillations of the electric current and magnetization.

Известно, что в ферромагнитных полупроводниках с колоссальным магнетосопротивлением (КМС) реализуется аномально сильная связь спиновой и электронной подсистем, которая приводит при магнитном фазовом переходе к андерсоновской локализации электронов проводимости и к электронному переходу металл–изолятор [1]. Однако микроскопическая природа магнитного фазового перехода в рассматриваемой группе ферромагнитных полупроводников, например, в манганитах лантана, окончательно не установлена. Для описания зонного движения s- и d-электронов в конкретных соединениях ферромагнитных полупроводников с КМС необходимы первопринципные DFT-расчеты их электронных спектров и плотностей электронных состояний. При этом следует отметить, что приведенные в базах данных сведения об электронной структуре металлического основного состояния данной группы полупроводников [2] указывают на наличие топологических особенностей электронного спектра.

В настоящей работе на примере $La_{1-x}Ca_xMnO_3$ исследуется фазовый переход первого рода во внешних электрическом и магнитных полях. Показано, что при фазовом переходе первого рода в ферромагнитных полупроводниках на основе манганитов лантана, наряду с полупроводниковой фазой s-электронов проводимости, возникает фаза с флуктуационным ближним порядком, связанным со сменой знака параметра межмодового взаимодействия в системе d-электронов. Область фазового расслоения характеризуется зависящими от температуры и внешнего магнитного поля флуктуациями локальной намагниченности. При этом заметное влияние на температуру фазового перехода первого рода, выше которой возникает фазовое расслоение, оказывает двойной обмен. Вследствие саморазогрева значительное влияние на фазовое расслоение

оказывает электрическое поле, которое приводит к N-образным вольтамперным характеристикам. На примере $La_{1-x}Ca_xMnO_3$ показано, что включение электрического и магнитного полей при фазовом переходе первого рода в ферромагнитных полупроводниках сопровождается возникновением автоколебаний электрического тока и намагниченности.

1. Н.Г. Бебенин, Р.И. Зайнуллина, В.В. Устинов. УФН 188, 8, 801 (2018).
Topological Materials Database: https://topologicalquantumchemistry.com

АНАЛИЗ ИНТЕГРО-ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ МОДЕЛИ ПРОЦЕССА КРИСТАЛЛИЗАЦИИ С УЧЕТОМ ПОДАЧИ ПРИМЕСИ, РОСТА ЧАСТИЦ И УДАЛЕНИЯ КРИСТАЛЛОВ ПРОДУКТА

Маковеева Е.В.[1]
[1)] Лаборатория "Стохастический транспорт наночастиц в живом организме", Уральский федеральный университет
E-mail: eugenya1m@gmail.com

ANALYSIS OF AN INTEGRO-DIFFERENTIAL MODEL FOR CRYSTALLIZATION PROCESS WITH ACCOUNT OF IMPURITY FEEDING, GROWTH OF NUCLEI AND REMOVAL OF CRYSTALS

Makoveeva E.V.[1]
[1)] Laboratory of Stochastic Transport of Nanoparticles in Living Systems, Ural Federal University

In this study, the theory of continuous crystallization from a supersaturated solution is developed, taking the concentrationdependent fines dissolution, product removal and feed supply rates into account. These rates make it possible to control the operation mode of the crystallizer.

Данное исследование посвящено объемной кристаллизации из пересыщенного раствора с учетом зависимости растворения мелких частиц от концентрации, удаления кристаллов продукта и скорости подачи примеси. Теория основана на кинетическом уравнении для функции распределения частиц по размерам и уравнении баланса массы для концентрации растворенного вещества. Скорости роста представляют собой вклады источника и стока в уравнения модели. Их изменение в зависимости от концентрации растворенного вещества позволяет управлять режимом работы кристаллизатора и получать требуемый выход кристаллов продукта. Сначала были найдены стационарные решения, когда от времени ничего не зависит. При этом стационарная функция распределения уменьшается с размером частиц и имеет точки излома, соответствующие удалению мелких частиц и размеру кристаллов продукта. Далее, вводя модифицированную переменную времени, было построено приближенное аналитическое решение нестационарной задачи. Распределение частиц по размерам находится как функция концентрации растворенного вещества с использованием метода интегрального преобразования Лапласа. Чтобы найти зависящую от времени концентрацию растворенного вещества, удобно воспользоваться методом перевала для оценки интеграла типа Лапласа и получить одноточечную задачу Коши для концентрации растворенного вещества. При этом реальное время, концентрация растворенного вещества и распределение частиц по размерам находятся как функции модифицированной

временной переменной. Таким образом, нестационарное решение выводится в параметрической форме, где модифицированное время представляет собой переменную решения. Нестационарная функция распределения приближается к стационарному профилю с увеличением времени. Это может означать стабильный режим работы кристаллизатора. Однако точное определение областей параметрической устойчивости и расчет амплитуд автоколебаний требует разработки линейных и нелинейных теорий устойчивости. Это важный шаг в развитии настоящей теории.

Развитая теория имеет место до тех пор, пока расстояния между растущими кристаллитами намного превышают их размеры, т.е. пока взаимодействием между частицами можно пренебречь. Если частицы расположены достаточно близко друг к другу, необходимо учитывать их возможную коагуляцию, дробление и оствальдово созревание. Если это действительно так, то математическая модель значительно усложняется и требует разработки методов ее решения.

Также отметим, что настоящий анализ может быть распространен и на описание одновременной объемной и направленной кристаллизации. Такой анализ можно провести с помощью теории кристаллизации с двухфазным слоем [1, 2] и рассматриваемого аналитического подхода.

Российский научный фонд [№ 22-79-00141]

1. Hills R.N., Loper D.E., Roberts P.H. A thermodynamically consistent model of a mushy zone // Q J Appl Math. – 1983. – V. 36. – P. 505–539.
2. Worster M.G. Solidification of an alloy from a cooled boundary // J Fluid Mech. – 1986. – V. 167. – P. 481–501.

ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА ТЕРМОПОЛИМЕРИЗОВАННЫХ СТРУКТУР g-C_3N_4

Мартемьянов Н.А.[1], Ильяшенко И.Н.[1], Ищенко А.В.[1], Вайнштейн И.А.[1, 2]
[1)] НОЦ НАНОТЕХ, Уральский федеральный университет, 620002, Россия, Екатеринбург, ул Мира, 19
[2)] Институт металлургии УрО РАН, 620016, Екатеринбург, ул. Амундсена, 101
E-mail: n.a.martemianov@urfu.ru

PHOTOLUMINESCENT PROPERTIES THERMOPOLYMERIZED STRUCTURES g-C_3N_4

Martemyanov N.A.[1], Ilyashenko I.N.[1], Ishchenko A.V.[1], Weinstein I.A.[1, 2]
[1)] NanoTech Center, Ural Federal University, 620002, Russia, Yekaterinburg, Mira str., 19
[2)] Institute of Metallurgy of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, 620016,Russia, Yekaterinburg, Amundsen Str.,101

The photoluminescence (PL) spectra of g-C_3N_4 samples synthesized from urea at temperatures of 450-600 °C were investigated. The red shift of PL emission band with a change in its spectral shape with an increase in the polymerization temperature was analyzed.

Графитоподобный нитрид углерода g-C_3N_4 является неметаллическим полупроводником со слоистой полимерной структурой и, с точки зрения практических применений, обладает рядом интересных свойств [1, 2]. В частности, его высокая каталитическая и люминесцентная активность может варьироваться в зависимости от режимов синтеза. В настоящее время исследования и оптимизация его физико-химических характеристик, преимущественно, связаны с возможными применениями в качестве катализатора и фотокатализатора. В то же время, на наш взгляд, изучению механизмов формирования оптических и люминесцентных свойств в g-C_3N_4 уделяется недостаточно внимания. В данной работе представлены результаты экспериментальных исследований спектров свечения и возбуждения фотолюминесценции серии синтезированных образцов g-C_3N_4, которые дополняют имеющиеся в литературе сведения.

Исследуемые образцы графитоподобного нитрида углерода были синтезированы методом термополимеризации мочевины при различных температурах в диапазоне 450–600 °C [2]. Аттестация полученных образцов проведена методами рентгенофазового анализа и ИК-спектроскопии. Экспериментальные спектры свечения и возбуждения ФЛ в диапазоне 200–800 нм измерены при комнатной температуре с использованием спектрометра Perkin Elmer LS-55.

Установлено, что в спектрах ФЛ всех синтезированных структур наблюдается широкая полоса свечения в области 2.0–3.2 эВ. При этом с ростом температуры синтеза спектральный максимум смещается от 2.76 до 2.57 эВ, а полуширина

увеличивается от 0.48 до 0.61 эВ. Кроме того, форма полосы изменяется от несимметричной у CN450 до более симметричной у CN550 и имеющей плечо в случае CN600.

Обнаруженное смещение максимумов свечения в низкоэнергетическую область с температурой синтеза может быть связано с изменениями параметров структуры материала, в частности длины связей C-N. Указанные трансформации обусловлены уменьшением расстояний между полимерными слоями и, соответственно, увеличением расстояний между гептазиновыми блоками [2].

Спектры возбуждения всех образцов имеют выраженные максимумы в 3.35 и 4.42 эВ. Начиная с температуры синтеза 500 °C в спектре проявляется слабо выраженное плечо 3.2 эВ. Максимальная интенсивность ФЛ наблюдается при возбуждении фотонами с энергией 3.35 эВ. Обсуждается природа возможных оптических переходов, ответственных за наблюдаемое свечение в синтезированных структурах графитоподобного нитрида углерода

Работа выполнена при поддержке научного проекта Минобрнауки РФ FEUZ-2023-0014.

1. Н. А. Мартемьянов, И. Н. Ильяшенко, Р. В. Камалов, А.В. Ищенко, И.А. Вайнштейн, Известия российской академии наук. серия физическая, 86, 10, 1435-1440, 2022
2. Н. А. Мартемьянов, И. Н. Ильяшенко, И. Н. Байнов, Р.В. Камалов, А.С. Вохминцев, И.А. Вайнштейн, Физика. Технологии. Инновации: сборник статей VIII Международной молодежной научной конференции, Екатеринбург, 17–21 мая 2021 г., 189-197, 2021

РАМАНОВСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ МОДИФИЦИРОВАННОГО CaF_2

Маслова С.А.[1], Корх Ю.В.[1], Кузнецова Т.В.[1, 2]
[1)] Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2)] УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
E-mail: ms@imp.uran.ru

RAMAN SPECTROSCOPY OF MODIFIED CaF_2

Maslova S.A.[1], Korkh Yu.V.[1], Kuznetsova T.V.[1, 2]
[1)] M.N. Mikheev lnstitute of Metal Physics of Ural Branch of Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia
[2)] Ural Federal University named after the first President of Russia B.N.Yeltsin, Yekaterinburg, Russia

In this work the Raman spectra of CaF_2 samples before and after additive staining were studied on a Confotec MR 200 Raman spectrometer. In addition, an image of the colloidal centre was obtained by mapping.

В лазерной оптике распространенным материалом для получения, обработки и хранения информации являются монокристаллы CaF_2 [1]. Для расширения оптического диапазона работы и оптимизации свойств кристаллов используются различные методы модификации кристаллической структуры. Для образования дефектов в ионных кристаллах можно использовать облучение ускоренными электронами или аддитивное окрашивание.

Модифицированные образцы для исследований были предоставлены Ангерваксом А.Е. и Рыскиным А.И. из университета ИТМО, которые получены путем нагрева кристаллов в восстановительной атмосфере паров Ca при 1000°C (аддитивное окрашивание). Этот процесс разрушает кристаллическую стехиометрию за счет образования центров окрашивания.

В данной работе изучались спектры комбинационного рассеяния образцов CaF_2 до и после модификации, полученные на рамановском спектрометре Confotec MR 200.

В спектрах комбинационного рассеяния чистого CaF_2 наблюдается характерный пик на 320 $см^{-1}$. Для окрашенных кристаллов основной пик становится шире с выделенным плечом на 329 $см^{-1}$. Кроме того, появляются дополнительные моды при 66, 140, 217, 280 и 413 $см^{-1}$, что может характеризовать появление соответствующих дефектов в аддитивно окрашенном флюорите. Также было получено изображение коллоидного центра с помощью картирования.

Комбинационная спектроскопия может быть использована для визуализации центров окраски и коллоидных центров в кристаллах CaF_2.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «Спин» Г.р. № 122021000036-3).

1. Shcheulin A.S., Angervaks A.E., Aksenova K.A., Gainutdinov R.V., Ryskin A.I., Optics and Spectroscopy, 118, 542 (2015).

ОЦЕНКА МЕХАНИЧЕСКИХ НАПРЯЖЕНИЙ В СТАЛЬНОЙ ПЛАСТИНЕ ПРИ ИЗГИБЕ ПО МАГНИТНЫМ ПАРАМЕТРАМ

Матосян А.М.[1, 2], Сташков А.Н.[2], Щапова Е.А.[2]
[1)] Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: matosian01@gmail.com

ASSESSMENT OF MECHANICAL STRESSES IN STEEL PLATE DURING BENDING BY MAGNETIC PARAMETERS

Matosyan A.M.[1, 2], Stashkov A.N.[2], Schapova E. A.[2]
[1)] Urals Federal University, Ekaterinburg, Russia
[2)] M.N. Mikheev lnstitute of Metal Physics of Ural Branch of Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russia

The object of the study was a plate of steel 20 under the influence of mechanical stresses. The field dependences of the eddy current transducer at different frequencies of the alternating magnetic field were obtained. The mathematical processing of the obtained curves was performed.

Контроль механических напряжений в стальных конструкциях является важной научно-технической задачей. Из неразрушающих методов контроля напряженно-деформированного состояния стальных ферромагнитных конструкций применяют среди прочих и магнитные методы из-за высокой чувствительности магнитных свойств к уровню механических напряжений. Однако методы, основанные на определении магнитных параметров на петлях магнитного гистерезиса и кривой намагничивания, а также на профиле шумов Баркгаузена, имеют существенный недостаток - измеряемые параметры зависят не только от уровня напряжении, но и от мешающих структурных факторов. Поэтому для определения механических напряжений в низкоуглеродистых сталях был разработан безградуировочный метод [1,2], основанный на экспериментальном определении полей смещения 90 градусных доменных границ, наиболее чувствительных к механическим напряжениям. Цель данной работы – оценка механических напряжений по магнитным параметрам при изгибе стальной пластины из стали 20.

Объектом исследования служила пластина из стали 20, концы которой располагались на опорах. К центру пластины подвешивался груз и изгибал ее в упругой области деформаций. Размеры пластины составили 650х59,3х5,6 мм.

Измерения магнитных параметров осуществлялись с помощью первичного преобразователя, состоящего из приставного электромагнита (ПЭМ) и вихретокого преобразователя (ВТП). В межполюсном простанстве ПЭМ располагался датчик Холла для измерения тангенциальной составляющей поля на поверхности контролируемой пластины. Первичный преобразователь

создавал в локальной области контролируемого объекта одновременно двух магнитных полей: намагничивающего квазистатического (медленно изменяющегося) поля приставного электромагнита (ПЭМ) и подмагничивающего переменного поля, создаваемого плоской катушкой ВТП.

Управление первичным преобразователем и обработка полученных полезных сигналов осуществлялась с помощью электронного блока, который состоял из усилителя мощности, двух предварительных усилителей сигнала, платы управления АЦП/ЦАП NI USB-6211 и ноутбука.

Измерены полевые зависимости сигнала ВТП U~(H) при разных частотах подмагничивающего переменного магнитного поля: 30, 300, 1000 и 2250 Гц. Проведена математическая обработка полученных кривых U~(H). Определены поля максимумов H1 и H2 на кривых U~(H). Установлено, что расстояние между максимумами на кривых U~(H) с ростом частоты возбуждения ВТП увеличивается, что может быть связано с увеличением механических напряжений в поверхностных слоях пластины. По полям максимумов рассчитаны величины упругих сжимающих напряжений на верхней стороне упруго изогнутой пластины из стали 20. Тем самым, меняя условия перемагничивания ферромагнитной пластины, появляется возможность оценки механических напряжений на разных толщинах при изгибе.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «Диагностика», №122021000030-1)

1. Ничипурук, А. П., Сташков, А. Н., Кулеев, В. Г., Щапова, Е. А., & Осипов, А. А.,Дефектоскопия,№ 11.,С. 20-26(2017)
2. Ничипурук А.П.,Розенфельд Е.В.,Огнева М.С.,Сташков А.Н.,Королев А.В.,Дефектоскопия,№ 10.,С. 18-26(2014)

MODELING THE FREQUENCY DEPENDENCE OF THE MAGNETOIMPEDANCE EFFECT OF AMORPHOUS RIBBONS BY THE FINITE ELEMENT METHOD

Pasynkova A.A.[1, 2], Matveeva M.S.[1], Kurlyandskaya G.V.[1]
[1)] Institute of Natural Sciences and Mathematics, Ural Federal University, 620002 Ekaterinburg, Russia
[2)] M.N. Mikheev Institute of Metal Physics of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Russia
E-mail: milana.matveeva.2001@mail.ru

Frequency dependence of the magnetoimpedance effect of amorphous ribbons was studied. Different reasons of the discrepancy in magnitude of theoretically calculated sensitivity and experimental data were considered. A complementary model for variation of magnetic permeability was created.

The impedance of some ferromagnetic materials is observed to be strongly dependent on the applied magnetic field and the driving frequency [1]. This phenomenon has been called the magnetoimpedance effect (MI). It is observed in ferromagnetic materials with well-defined magnetic anisotropy (for example, amorphous ribbons). Transverse uniaxial magnetic anisotropy can be created in Co-based amorphous ribbons due to low negative magnetostriction as a result of stress-annealing. This makes it possible to obtain materials with sensitivity to an external magnetic field reaching hundreds of percent per Oersted. However, the theoretically calculated sensitivity and experimental data have a discrepancy in magnitude, due to different reasons. One of the important parameters is the magnitude of the anisotropy field, which leads to a high MI effect, reflecting a weak magnetic anisotropy [2]. Another parameter that makes the main contribution to the magnitude of the MI effect is the dynamic magnetic permeability. If we consider the impedance from the point of view of classical electrodynamics and use a relatively high value for magnetic permeability, then the frequency dependence of the MI effect will be an increasing power function [3]. Whereas the experimental dependences for Co-based alloys [1] are frequency dependences with a maximum in the frequency range characteristic of the MI effect (1-100 MHz). The purpose of this work was to study the frequency dependence of the magnetoimpedance effect of amorphous ribbons using the finite element method in the Comsol Multiphysics software package.

A complementary model for variation of magnetic permeability was created using Comsol Multiphysics software package based on finite element method. The dependences of magnetic permeability on the frequency of the exciting current and the external magnetic field were found as a solution of the linearized Landau-Lifshitz-Hilbert equation. The sample shape considered to be a rectangular parallelepiped with characteristic values of electrical conductivity 0.295 MS/m and anisotropy field of 5

Oe that varied in small range as well as the value of the frequency of the flowing current (range 0.1 - 100 MHz) and equilibrium magnetization angle. The ribbon had scales of 5×0.2×0.0003 (cm^3). The dispersion angle of effective magnetic anisotropy was equal to 0.1π.

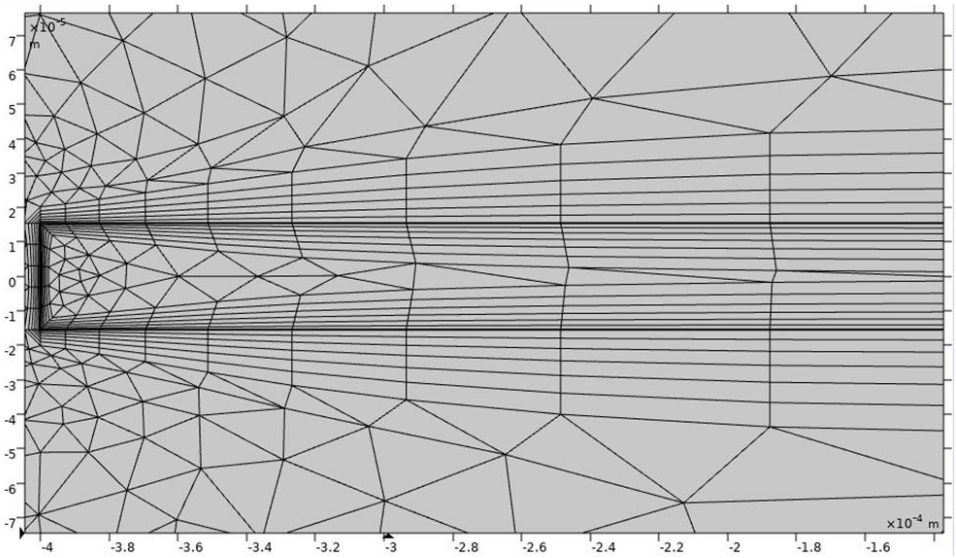


Fig. 1 - The image is an example of meshing for a ribbon, side view

The research was carried out within the state assignment of M.N. Mikheev Institute of Metal Physics of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences of № AAAA-A18-118020290129-5 (theme "Magnet")

1. Tejedor, M., Hernando, B., Sánchez, M. ., Prida, V. ., Kurlyandskaya, G. ., García, D., & Vázquez, M. (2000). Frequency dependence of hysteretic magnetoimpedance in CoFeMoSiB amorphous ribbons. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 215-216, 425–427
2. Ludek Kraus, GMI modeling and material optimization, Sensors and Actuators A 106 (2003) 187–194
3. García, D., Raposo, V., Montero, O., and Íñiguez, J. I. (2007). Theoretical estimation of magnetoimpedance frequency dependence in amorphous wires. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 316(2), e846–e849

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ ОТЖИГА НА ФАЗОВЫЙ СОСТАВ ТОНКИХ ПЛЁНОК α-Fe_2O_3

Меренцова К.А.[1], Изюров В. В.[1], Артемьев М.С.[1], Десятников И.А.[1], Дубинин С.С.[1], Носов А.П.[1]
[1)] Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, Екатеринбург, Россия
E-mail: merencovak@imp.uran.ru

INFLUENCE OF ANNEALING TEMPERATURE ON THE PHASE COMPOSITION OF α-Fe_2O_3 THIN FILMS

Merencova K.A.[1], Izyurov V.V.[1], Artemyev M.S.[1], Desyatnikov I.A.[1], Dubinin S.S.[1], Nosov A.P.[1]
[1)] M.N. Mikheev Institute of Metal Physics, Ural Branch of Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russia

The phase composition of hematite α-Fe_2O_3 thin films with the thickness of 100 nm on the c-Al_2O_3 substrates was studied. The dependence of the lattice parameter c on the annealing temperature was determined.

Гематит α-Fe_2O_3 – это материал с антиферромагнитным типом упорядочения при температурах ниже 260 K (температура Морина) и «слабым» ферромагнетизмом в интервале температур от 260 K до 950 K (температура Нееля). "Слабый" ферромагнетизм обусловлен возникновением в этом интервале температур слабо неколлинеарной магнитной структуры за счет симметрии магнитных подрешеток [1] и анизотропного сверхобменного взаимодействия [2].

Гематит рассматривается как перспективный материал для антиферромагнитной спинтроники [3], приборов и устройств информатики, робототехники и телекоммуникаций следующего поколения [4]. Как минерал и магнитный материал, гематит изучается уже достаточно давно. При этом основные исследования физических свойств были выполнены на объемных материалах (моно- и поликристаллах), а в современных приложениях спинтроники востребованы тонкие пленки и наногетероструктуры.

Цель нашей работы - получение тонких плёнок гематита на монокристаллических подложках c-Al_2O_3 и исследование их фазового состава в зависимости от температуры термообработки на воздухе.

Пленки α-Fe_2O_3 (100 нм) были получены методом магнетронного распыления стехиометрической мишени на переменном токе в атмосфере 90%Ar + 10%O2. В процессе распыления температура подложки составляла 473K. После получения, пленки термообрабатывали на воздухе при температурах 673 K и 1023 K в течение 3 часов. Рентгеноструктурные исследования проводили на

дифрактометре PANalytical Empyrean. Измерения спектров проходили в больших углах.

Из экспериментальных данных нами сделаны следующие выводы. При температурах термообработки до 973 K образцы являются однофазными. Начиная с температуры 1023 K в основной фазе гематита начинает формироваться фаза магнетита Fe_3O_4 доля которой возрастает с ростом температуры термообработки (см. рисунок 1).

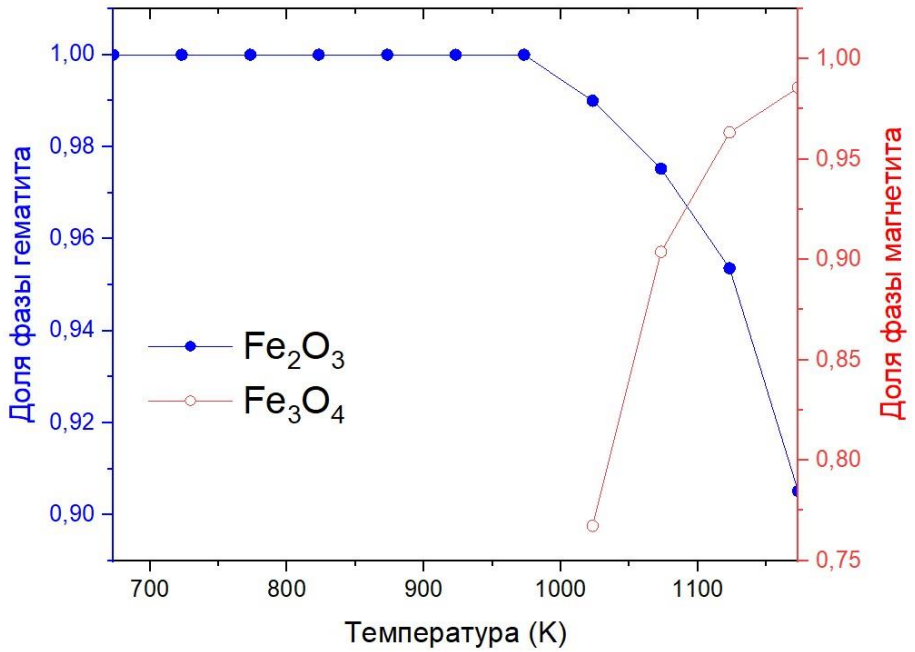


Рис. 1. Зависимость фазового состава плёнок α-Fe2O3 (100 нм) от температуры термообработки

Параметр решетки с фазы α-Fe_2O_3 при температурах термообработки до 673 K такой же, как и у объёмного монокристалла [5] (c=1,374 nm), но начинает систематически уменьшаться с ростом температуры термообработки

1. I. Dzyaloshinsky, JETP. 32,1547 (1957).
2. T. Moriya, Phys. Rev.120, 91 (1960).
3. V. Baltz, A. Machnon, M. Tsoi et. al., Rev. Mod. Phys. 90, 012002 (2018).
4. X. Liu et al. Sci. Rep. 4, 7452 (2015).
5. https://materials.springer.com/isp/crystallographic/docs/sd_0545731

ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И СТРУКТУРА НЕСТЕХИОМЕТРИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ $(Fe,Ti)S_{1.8}$

Мозговых С.Н.[1], Шерокалова Е.М.[1], Баранов Н.В.[1, 2], Селезнева Н.В.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, ИЕНиМ, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: stepan.mozgovykh@urfu.ru

PHYSICAL PROPERTIES AND STRUCTURE OF NONSTOICHIOMETRIC COMPOUNDS $(Fe,Ti)S_{1.8}$

Mozgovykh S.N.[1], Sherokalova E.M.[1], Baranov N.V.[1, 2], Selezneva N.V.[1]
[1)] Ural Federal University, Institute of Natural Sciences and Mathematics, Ekaterinburg, Russia
[2)] Institute of Metal Physics of Ural Branch of Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russia

Iron-containing compounds $(Fe,T)S_{1.8}$ have been synthesized based on the nonstoichiometric matrix $TiS_{1.8}$. The ordering of Fe atoms, the formation of a superstructure and various magnetic states have been revealed.

Дихалькогениды переходных металлов MX_2 со слоистой кристаллической структурой, в которой гексагональные слои переходного (M) металла расположены между двумя гексагональными слоями атомов халькогена (X), вызывают неослабевающий интерес благодаря богатому разнообразию необычных свойств и потенциальных применений [1]. Так, в системе Fe_xTiS_2 при низких концентрациях Fe ($x < 0.2$), магнитное поведение соединений можно классифицировать как спинстекольное или спинкластерное. Увеличение концентрации Fe до $x \sim 0.2$ сопровождается монотонным ростом температуры замерзания T_f. При $x = 0.33$ наблюдается понижение критической температуры до ~ 44 K и образование треугольной сетки внедренных атомов и упорядочение $\sqrt{3}a_0*\sqrt{3}a_0*2c_0$. Магнитное состояние $Fe_{0.45}TiS_2$ неоднородно и представляет собой матрицу с дальним АФМ порядком ниже температуры Нееля около 135 K, в которой формируются области (кластеры) с ближним магнитным порядком, ниже $T_f \sim 100$ K. Соединение с $x = 0.50$ демонстрирует АФМ упорядочение во всем диапазоне температур ниже 140 K. Дальнейшее увеличение концентрации железа выше $x = 0.50$ приводит к ферро- или ферримагнитному упорядочению [2].

На данный момент нет литературных данных о влиянии отклонения от стехиометрии в матрице $TiS_{2-\delta}$ на структурные и магнитные особенности формирования допированных соединений типа $Fe_xTiS_{2-\delta}$. Поэтому в данной работе были получены образцы $Fe_xTiS_{1.8}$ при ($\delta = 0.2$) с содержанием железа $x = 0.25$ и $x = 0.37$.

Образцы были получены стандартным твердофазным методом в вакуумированных кварцевых ампулах. Аттестация фазового состава и структуры, выполнена на дифрактометре Bruker D8 Advance. Температурные и полевые зависимости намагниченности измерялись на установках PPMS DynaCool 9 и MPMS SQUID XL7 (Quantum Design, США). Температурные и полевые зависимости электросопротивления измерялись на установке DMS-1000 фирмы Dryogenic (Великобритания).

При изучении структуры полученных образцов оказалось, что соединения $Fe_{0.25}TiS_{1.8}$ и $Fe_{0.37}TiS_{1.8}$ изоструктурны составу $Fe_{0.33}TiS_2$. Образование треугольной сетки атомов Fe и формирование сверхструктуры $\sqrt{3}a_0*\sqrt{3}a_0*2c_0$. выявлено уже при концентрации Fe x = 0.25.

Установлено, что образец $Fe_{0.25}TiS_{1.8}$ обладает спинкластерным магнитным состоянием, а соединение $Fe_{0.37}TiS_{1.8}$ обладает дальним магнитным порядком и поведением намагниченности, подобным наблюдаемому в соединении $Fe_{0.75}TiS_2$. При этом, эффективный магнитный момент, определённый из анализа магнитной восприимчивости в парамагнитной области, оказался существенно ниже, чем в соединениях Fe_xTiS_2 на основе стехиометрической матрицы TiS_2. Причины наблюдаемых различий требуют дальнейшего исследования.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 22-13-00158).

1. Negishi H., Shoube A., Takahashi H., Ueda Y., Sasaki M., Inoue M., Magnetic properties of intercalation compounds MxTiS2 (M = 3d transition metal) // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. –1987. – Т. 67. – № 2. – P. 179-186.
2. Selezneva N.V., Baranov N.V., Sherokalova E.M., Volegov A.S., and Sherstobitov A.A., Multiple magnetic states and irreversibilities in the Fe_xTiS_2 system // Physical Review B. – 2021. – 104. – С. 064411.
3. Selezneva N.V., Baranov N.V., Sherokalova E.M., Volegov A.S., Sherstobitov A.A., Remnant magnetoresistance and virgin magnetic state in $Fe_{0.25}TiS_2$. // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2021. – Т. 519. – С. 167480.

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОЧАСТИЦ CeO_2 И CeO_2:RE

Мышкина А.В.[1], Пустоваров В.А[1], Жидков И.С.[1], Пронина М.О.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: a.v.myshkina@urfu.ru

ELECTRONIC STRUCTURE AND OPTICAL PROPERTIES OF CeO_2 AND CeO_2:RE NANOPARTICLES

Myshkina A.V.[1], Pustovarov V.A.[1], Zhidkov I. S.[1], Pronina M.O.[1]
[1)] Ural Federal University named after the First President of Russia B. N. Yeltsin, Ekaterinburg, Russian Federation

CeO_2 and CeO_2:RE nanoparticles were obtained by precipitation. The electronic structure and optical properties were studied using XPS, IR spectroscopy, Raman spectroscopy, and photoluminescence spectroscopy.

Нанокристаллический оксид церия считается одним из перспективных объектов для применения в различных областях, например, в катализе или биомедицине. При переходе в наноразмерное состояние на поверхности частиц образуются ионы Ce^{3+}, что приводит к формированию кислородных вакансий вследствие кислородной нестехиометрии. Появление таких собственных дефектов ведет к изменению кислородной нестехиометрии. Однако, в литературе мало работ, изучающих появление анионных вакансий примесных редкоземельных ионов. Поэтому целью работы является исследование оптических свойств и электронной структуры наночастиц оксида церия, допированных ионами редкоземельных ионов.

Наночастицы CeO_2 и CeO_2, допированные РЗИ, были получены методом осаждения. Аттестация образцов проводилась различными методами электронной микроскопии и рентгеновской дифракции. Рентгеновская фотоэлектронная, оптическая и фотолюминесцентная спектроскопия использовалась для оценки электронной структуры.

Анализ спектров РФЭС показал, что наличие ионов Ce^{3+} в нанокристаллах CeO_2 приводит к росту концентрации кислородных вакансий в кристаллической структуре CeO_2. Спектр поглощения описывается электронными переходами между ВЗ и незаполненной 4f-орбиталью иона Ce^{4+}, формирующих полосу переноса заряда $O\ 2p^6 \rightarrow Ce\ 4f^0$ в спектрах поглощения. На спектрах фотолюминесценции полоса 3,3 эВ обусловлена излучательными межконфигурационными $5d \rightarrow 4f$ переходами в ионах Ce^{3+}, находящихся в узлах кристаллической решетки в качестве ионов замещения.

Фотолюминесценция в видимой области связана с дефектами кристаллической решетки и появлением F-центров. Редкоземельные ионы Er^{3+} и Sm^{3+} внедрены в кристаллическую решетку как ионы замещения. Фотолюминесценция наночастиц оксида церия, модифицированных ионами Er^{3+} и Sm^{3+} характеризуется внутриконфигурационными излучательными 4f → 4f переходами. При этом возбуждение фотолюминесценции трехвалентных ионов происходит за счет транспорта энергии через комплекс переноса заряда.

Анализ спектров оптической и фотолюминесцентной спектроскопии позволил предложить энергетическую зонную схему переходов. Наблюдаемые переходы связаны с безызлучательной передачей энергии примесным трехвалентным ионам Er^{3+} и Sm^{3+}, и, частично, F- подобным центрам через полосу переноса заряда.

Результаты, полученные в данной работе, могут представлять интерес для разработки материалов с заранее известными свойствами.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (FEUZ-2023-0013)

1. Formation of luminescent centers in CeO_2 nanocrystals / Masalov, A. et al. // Journal of Luminescence. – 2014. – 145. – P. 61-64.
2. Low-temperature spectroscopy of optical centers in cerium-yttrium ($Ce_{1-x}Y_xO_{2-x/2}$) and cerium-zirconium ($Ce_{1-x}Zr_xO_2$) oxides / Okrushko, E.N. et al. // Low Temp. Phys. – 2017. – 43(5). – № 636.
3. Approaches for the quantitative analysis of oxidation state in cerium oxide nanomaterials / Sims, C. et al. // Nanotechnology. – 2018. – 30. – 085703

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ МАГНИТОТРАНСПОРТНЫХ СВОЙСТВ СВЕРХРЕШЕТОК НА ОСНОВЕ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Найданов И. А.[1, 2], Захаров А. А.[1, 2], Миляев М. А.[1], Проглядо В. В.[1]
[1)] Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: ivannayd_1999@mail.ru

PREDICTION OF MAGNETOTRANSPORT PROPERTIES OF SUPERLATTICES BASED ON MACHINE LEARNING METHODS

Naydanov I. A.[1, 2], Zakharov A. A.[1, 2], Milyaev M. A.[1], Proglyado V. V.[1]
[1)] M.N. Miheev Institute of Metal Physics, UB RAS, Ekaterinburg, Russia
[2)] Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia

In the course of this work, a regression machine learning model was constructed based on a set of experimental data capable of predicting the magnetotransport properties of CoFeNi/Cu and CoFeNi/CuIn superlattices

Периодические многослойные наноструктуры (сверхрешетки), состоящие из обменно-связанных магнитных слоев, разделенных немагнитными проводящими прослойками, под воздействием магнитного поля способны изменять сопротивление вследствие эффекта гигантского магнитосопротивления (ГМС). Такие структуры интересны с практической точки зрения в качестве сенсорных элементов датчиков магнитных полей. От магнитотранспортных свойств сверхрешеток напрямую зависят параметры сенсорных элементов на их основе, такие как амплитуда сигнала, диапазон регистрируемых полей, линейность и т. д.

Поиск композиций сверхрешеток с оптимальными магнитотранспортными свойствами, может занимать достаточно долгое время, поскольку приходится напылять десятки образцов, чтобы подобрать структуру с желаемыми характеристики. Применение алгоритмов машинного обучения потенциально помогло бы ускорить поиск композиций сверхрешеток с оптимальными свойствами. За последние годы, методы машинного обучения активно внедряются для исследований в различных областях физики. Так, например, в работе [1] показано, что модель Kernel Ridge Regression построенная на небольшом наборе данных позволяет предсказать ширину запрещенной зоны бинарных полупроводниковых соединений с большей точность, чем результаты первопринципных расчетов с использованием обобщенного градиентного приближения. Также методы машинного применялись для предсказания ширины петли гистерезиса и поля обменного смещения двойных нанослоев FeNi/FeMn на основе данных, полученных с помощью микромагнитного моделирования [2].

Цель данной работы заключалась в построении регрессионной модели машинного обучения, способной предсказывать величину магнитосопротивления, гистерезис и поле насыщения ГМС наноструктур на основе данных композиций структур, составов сплавов магнитных и немагнитных слоев и физических величин сплавов, характеризующих магнитные и транспортные свойства. Обучение и тестирование модели производилось на наборе данных включающий в себя информацию о более чем 300 напыленных сверхрешеток CoFeNi/Cu и CoFeNi/CuIn изготовленных методом магнетронного напыления в ИФМ УрО РАН в лаборатории квантовой наноспинтроники.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России по темам «Спин» 122021000036-3 и «Магнит» 122021000034-9.

1. Ying Zhang, Chen Ling, npj Computational Materials, vol. 4, № 25, 2018 (https://doi.org/10.1038/s41524-018-0081-z).
2. N. Kulesh, N. Permyakov, et. al, IEEE Transactions on Magnetics, vol. 58, № 2, 2022 (https://doi.org/10.1109/TMAG.2021.3077288).

ЭВОЛЮЦИЯ ПОЛИДИСПЕРСНОГО АНСАМБЛЯ ЧАСТИЦ НА ПРОМЕЖУТОЧНОЙ СТАДИИ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА

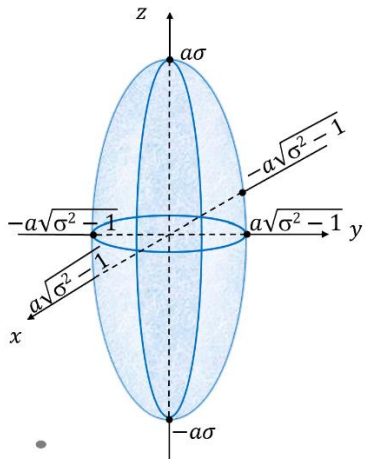
Никишина М.А.[1], Александров Д.В.[1]
[1)] Уральский Федеральный Университет
E-mail: mapgosha98@yandex.ru

EVOLUTION OF A POLYDISPERSE PARTICLE ENSEMBLE AT AN INTERMEDIATE PHASE TRANSITION

Nikishina M.A.[1], Alexandrov D.V.[1]
[1)] Ural Federal University

In this work we will present three models for the growth rate of ellipsoidal particles in metastable systems. A model for supercooled one-component melts, a model for supersaturated solutions and a model for binary melts. Let us consider their differences between them, compare the obtained data with

В рамках классической теории зарождения кристаллов [1-3], гомогенный или гетерогенный процесс созревания новых ядер в метастабильных жидкостях и их последующий рост описаны на основании предположения, что эволюционирующие кристаллы имеют сферическую форму. Многие эксперименты и компьютерные симуляции доказывают, что зачастую формы растущих частиц далеки от сферической и скорее даже продолговатые [4]. Поэтому было решено усовершенствовать теорию с помощью следующего приближения - эллипсоидального.



$$x^2 = a^2(\sigma^2 - 1)(1 - \tau^2)\cos^2\phi,$$
$$y^2 = a^2(\sigma^2 - 1)(1 - \tau^2)\sin^2\phi,$$
$$z = a\sigma\tau$$

a − постоянная
переменная
$\sigma \geq 1$
$-1 \leq \tau \leq 1$
$0 \leq \phi \leq 2\pi$

Рис. 1. Эллипсоидальная частица в координатах вытянутого эллипсоида вращения

Данная работа посвящена теории зарождения и роста эллипсоидальных кристаллов в переохлажденных расплавах и пересыщенных растворах. Всего было построено три модели эволюции частиц. Модель для переохлажденных

однокомпонентных расплавов, модель для пересыщенных растворов и модель для бинарных расплавов. В первой части доклада мы изложим теорию роста эллипсоидального монокристалла на промежуточной стадии фазовых превращений и покажем различие в скоростях объемного роста для всех трех случаев. Вторая часть доклада будет посвящена эволюции полидисперсного ансамбля эллипсоидальных частиц. Для получения математического описания этого процесса была решена соответствующая краевая задача с использованием системы координат вытянутого эллипсоида вращения. На данном этапе мы не учитывали флуктуации скоростей роста частиц. В третьей секции доклада мы рассмотрим модели, дополненные “диффузионным” членом в кинетическом уравнении, отвечающим за флуктуации в скоростях роста частиц.

Дополнительно, во всех трех разработанных моделях существует предельный переход, который позволяет трансформировать модель для эллипсоидальных частиц в ранее полученную модель для сферических частиц [5].

1. Slezov VV. Kinetics of first-order phase transitions. Weinheim, Germany:Wiley-VCH, (2009)
2. Dubrovskii VG. Nucleation theory and growth of nanostructures. Berlin, Germany: Springer, (2014)
3. Lifshitz EM, Pitaevskii LP. Physical kinetics. Oxford, UK: Pergamon, (1981)
4. Ocaña M, Morales MP, Serna CJ. J. Colloid Int. Sci.,171, 85–91, (1995)
5. Alexandrov DV, Alexandrova IV. Phil. Trans. R. Soc., A 377, 20180209, (2019)

КОМПЬЮТЕРНАЯ МОДЕЛЬ МАГНИТОРЕЗИСТИВНОГО ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЯ В ПРОГРАММНОЙ СРЕДЕ COMSOL MULTIPHYSICS

Низаев А.Н.[1], Ювченко А.А.[1], Васьковский В.О.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: azat.nizaev@urfu.me

A COMPUTER MODEL OF A MAGNETORESISTIVE SENSOR IN THE COMSOL MULTIPHYSICS

Nizaev A.N.[1], Yuvchenko A.A.[1], Vas'kovskii V.O.[1]
[1)] Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia

In the work, a model of a magnetoresistive sensor was built based on the Comsol Multiphysics software package. The dependence of the output signal on the external magnetic field is obtained.

При текущем уровне развития промышленности существует выраженная потребность в повсеместном использовании измерительных преобразователей, обеспечивающих высокую точность преобразования различных физических величин в электрический сигнал. Это в полной мере относится к магнитному полю, при детектировании которого нашли широкое применение сенсоры на основе анизотропного магнитосопротивления (АМС) [1]. Такие преобразователи должны иметь нечётную и линейную зависимость выходного сигнала от напряжённости магнитного поля в рабочем диапазоне, широкий интервал рабочих температур, быть устойчивы к разного рода помехам, а также иметь малые размеры и массу.

Современный рынок предлагает соответствующие сенсоры на основе тонких пленок пермаллоя $Fe_{20}Ni_{80}$ с относительной анизотропией магнитосопротивления около 2%. Они представляют собой 4 пермаллоевых магниторезистора, выполненных в форме наклонных меандров и собранных по мостовой схеме [2]. Для решения конкретных измерительных задач в ряде случаев требуется модификация функции преобразования описанных сенсоров, параметры которой зависят от целого ряда физических факторов: характеристики материала, в том числе величина наведённой магнитной анизотропии, геометрия плёночных элементов, наличие и величина смещающего поля. Данная работа посвящена созданию адекватной компьютерной модели АМС-сенсора, позволяющей расчётным путём оптимизировать указанные параметры.

Работа выполнялась в пакете численного моделирования Comsol Multiphysics с использованием встроенной библиотеки материалов. Из неё взяты характеристики сплава типа пермаллой, к которым относятся: кривая

намагничивания в поликристаллическом состоянии B(H); проводимость - 1.74 МСим/м; магниторезистивное отношение – 0.025. Модель позволяет варьировать топологию элементов меандра, а также предусматривает наличие однородных измеряемого и смещающего магнитных полей, которые взаимно перпендикулярны и определённым образом ориентированы в плоскости меандра. Схема расчёта включает следующие этапы: вычисление ориентации намагниченности в элементах меандров двух типов (отличаются ориентацией наклонных элементов по отношению к смещающему магнитному полю) при совместном действии смещающего H_b и измеряемого H магнитных полей; вычисление плотности тока по закону Ома при заданном напряжении питания и учёте АМС-эффекта в тензоре электропроводности; вычисление сопротивлений двух типов меандров; составление из меандров эквивалентной электрической схемы моста и нахождение выходного сигнала U как разности потенциалов между парами плеч моста. На рисунке 1 приведены примеры функции преобразования U(H), рассчитанной для нескольких значений напряжённости смещающего поля. Они показывают хорошее качественное согласие с экспериментом, что позволяет использовать данную модель в инженерной практике.

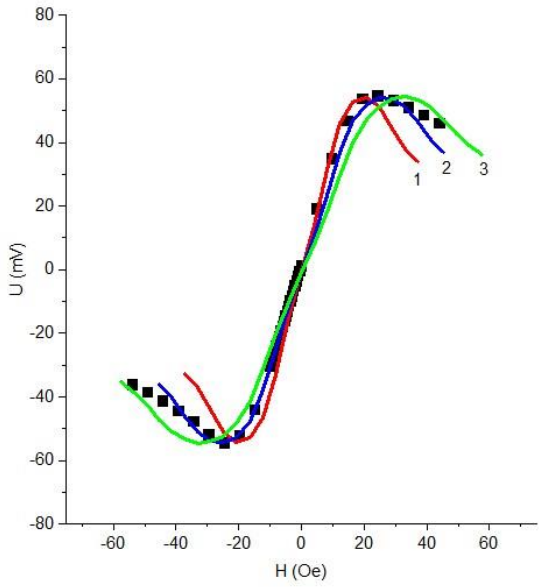


Рис. 1. Зависимости выходного сигнала от напряжённости измеряемого магнитного поля (сплошные линии), рассчитанные для разных значений поля Hb: 1 – 24,4; 2 – 32,5; 3 – 40,6 Э. Точками показаны результаты натурного эксперимента.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования РФ, тема FEUZ 2023 -0020.

1. Амеличев Владимир Викторович, Резнев Алексей Алексеевич, & Сауров Александр Николаевич (2020). МИКРОСИСТЕМЫ С ВЫСОКИМ КОЭФФИЦИЕНТОМ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ СЛАБОГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ОСНОВЕ МАГНИТОРЕЗИСТИВНЫХ НАНОСТРУКТУР. Известия высших учебных заведений. Электроника, 25 (5), 432-439.
2. Vas'kovskiy, V. O., Lepalovskij, V. N., Gor'kovenko, A. N., Kulesh, N. A., Savin, P. A., Svalov, A. V., Stepanova, E. A., Shchegoleva, N. N., & Yuvchenko, A. A. (2015). Fe20Ni80/Fe50Mn50 film magnetoresistive medium. Technical Physics, 60(1), 116-122. https://doi.org/10.1134/S1063784215010260

ЧИСЛЕННЫЙ РАСЧЕТ ФАЗОВЫХ ДИАГРАММ СИСТЕМЫ ЗАРЯЖЕННЫХ СПИН-ТРИПЛЕТНЫХ БОЗОНОВ КЛАССИЧЕСКИМ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

Нужин С.В.[1], Улитко В.А.[1], Панов Ю.Д.[1], Москвин А.С.[1]
[1)] Уральский Федеральный Университет, Институт естественных наук и математики, ул. Куйбышева, 48, Екатеринбург, 620026
E-mail: Nuzhin.Stepan@urfu.ru

PHASE DIAGRAM NUMERICAL CALCULATION OF A CHARGED SPIN-TRIPLET BOSONS SYSTEM BY THE CLASSICAL MONTE CARLO METHOD

Nuzhin S.V.[1], Ulitko V.A.[1], Panov Y. D.[1], Moskvin A. S.[1]
[1)] Ural Federal University, Natural Sciences and Mathematics Institute, Kuibyshev str., 48, Yekaterinburg, 620026

The spin-triplet boson model makes it possible to describe the magnetic states of antiferromagnets. In this regard, we calculate the order parameters of thermodynamic phases by the classical Monte Carlo method

Мы моделируем решеточный газ заряженных спин-триплетных бозонов, модель которого в последние годы популярна благодаря описанию димерных антиферромагнитных систем и ультрахолодных атомных газов в оптических решетках [1]. К системам, которые естественным образом описываются моделями решеточных бозонов, относятся материалы с зарядовым диспропорционированием [2]. Мы предполагаем, что в соединениях, изоструктурных купратам, например, AgF_2 [3], реализуется механизм зарядового диспропорционирования.

Рассмотрим систему заряженных бозонов со спином S=1, движущихся по узлам квадратной решетки. На каждом узле решетки базис $|n\sigma>$, где n – число бозонов, σ – проекция спина, включает 4 состояния: |0 0>, |1 1>, |1 0>, |1 -1>. Гамильтониан такой модели

$$H = -t\sum_{i\sigma}(B_{i\sigma}^{+}B_{j\sigma} + B_{i\sigma}B_{j\sigma}^{+}) + V\sum_{<ij>}n_in_j + J\sum s_is_j - h\sum_i s_i^z$$

описывает перенос (t) бозона на ближайший узел с сохранением проекции спина, заряд-зарядовые корреляции (V), одинаковые для разных проекций спина бозона, антиферромагнитный изотропный обмен (J) для бозонов на соседних узлах и взаимодействие бозонов с магнитным полем h.

Нами реализован классический алгоритм Монте-Карло, в котором плотность бозонов сохраняется на каждом элементарном шаге и рассчитаны фазовые диаграммы в рамках канонического и большого канонического ансамблей.

Полученные результаты сравниваются с предельными случаями для системы локальных (hard-core) бозонов и двумерной антиферромагнитной модели Гейзенберга, также сравниваются между собой результаты численного моделирования в рамках канонического и большого канонического ансамбля.

Работа выполнена при поддержке проекта
FEUZ-2023-0017 Министерства Образования и Науки Российской Федерации.

1. Giamarchi T., Rüegg C., Tchernyshyov O. Bose–Einstein condensation in magnetic insulators // Nature Physics. №4(3), p. 198–204, (2008)
2. Moskvin A. S. Perspectives of disproportionation driven superconductivity in strongly correlated 3d compounds // Journal of Physics: Condensed Matter. №25(8), p. 085601, (2013)
3. Grzelak A. et al. Epitaxial engineering of flat silver fluoride cuprate analogs //Physical Review Materials. №8(4), p. 084405, (2020)

РЕЛАКСАЦИЯ СИСТЕМЫ ЯН-ТЕЛЛЕРОВСКИХ КОМПЛЕКСОВ В КРИСТАЛЛЕ CdF_2:Cr

Сарычев М.Н.[1], Офицерова Н.Ю.[1], Жевстовских И.В.[1, 2], Егранов А.В.[3], Гудков В.В.[1]

[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

[2)] Институт физики металлов им. М. Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, Екатеринбург, Россия

[3)] Институт геохимии им. А. П. Виноградова Сибирского отделения Российской академии наук, Иркутск, Россия

E-mail: n.ofitserova@mail.ru

RELAXATION OF THE SYSTEM OF JAHN-TELLER COMPLEXES IN CdF_2:Cr CRYSTAL

Sarychev M.N.[1], Ofitserova N. Yu.[1], Zhevstovskikh I. V.[1, 2], Egranov A.V.[3], Gudkov V.V.[1]

[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia

[2)] M.N. Mikheev Institute of Metal Physics of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia

[3)] Vinogradov Institute of Geochemistry of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia

Anomalies in temperature dependence of ultrasound attenuation and velocity that are typical for the Jahn-Teller effect were observed in CdF_2:Cr crystal. Parameters characterizing relaxation mechanism of the Jahn-Teller subsystem were determined.

Выполнены исследования температурных зависимостей поглощения и скорости поперечных и продольных ультразвуковых волн, распространяющихся в образце CdF_2: Cr в направлении кристаллографической оси четвертого порядка. Измерения проводились на частотах 18–268 МГц в интервале 4–150 К. Были обнаружены аномалии, характерные для проявления ян-теллеровской подсистемы. При изовалентном замещении иона Cd^{2+} в этом кристалле формируется кубический ян-теллеровский комплекс, описываемый в рамках $T \otimes (e+t_2)$ задачи эффекта Яна-Теллера, такой же, как и в исследованных ранее кристаллах со структурой флюорита. Для выделения ян-теллеровского вклада в поглощение и скорость волн были измерены аналогичные температурные зависимости на номинально чистом кристалле CdF_2. Как примесный, так и номинально чистый кристаллы были выращены в Институте геохимии им. А. П. Виноградова. Температурная зависимость времени релаксации, построенная на основании данных о скорости моды c_{44}, приведена на рисунке. С помощью процедуры фитинга была получена модельная кривая, показанная сплошной

линией. При этом учитывались три механизма релаксации: термически активационный $\tau_a = \tau_0 \exp(V_0/T)$, туннельный $\tau_t = (BT)^{-1}$ и двухфононный $\tau_R = (BT^3/\theta_0^2)^{-1}$. В результате подгоночные параметры имели следующие значения $\tau_0 = 7 \cdot 10^{-13}$ с, $V_0 = 200$ К, $B^{-1} = 5 \cdot 10^{-7}$ 1/(сК), $(B/\theta_0^2)^{-1} = 0.1$ 1/сК^3. Наиболее важным параметром для построения адиабатического потенциала является энергия активации V_0. Её значение несколько выше, чем в кристаллах $CaF_2:Cr^{2+}$ [1] , $CaF_2:Cu^{2+}$ [2], но ниже, чем в $CaF_2:Ni^{2+}$ [3] и $SrF_2:Cr^{2+}$ [4].

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда

(проект № 22-22-00735).

1. Sarychev, M. N. Manifestation of the Jahn–Teller effect subject to quadratic T⊗e+t2 problem in ultrasonic attenuation. Case study of CaF2 :Cr crystal with isovalent and aliovalent substitution / M. N. Sarychev, W. A. L. Hosseny, I. V Zhevstovskikh, V. A. Ulanov, G. S. Shakurov, A. V Egranov, V. T. Surikov, N. S. Averkiev, V. V Gudkov // J. Phys.: Condens. Matter – 2022. – 34 (22). – С. 225401
2. Сарычев, М. Н. Адиабатический потенциал ян-теллеровских комплексов Cu2+F−8 в кристалле флюорита / М. Н. Сарычев, У. А. Л. Хоссени, И. В. Жевстовских, В. А. Уланов, А. В. Егранов, В. Т. Суриков, Н. С. Аверкиев, В. В. Гудков // ЖЭТФ. – 2022. – 162. – С. 509–521
3. Sarychev, M. N. Adiabatic potential energy surface of the Jahn-Teller complexes in CaF2:Ni2+ crystal determined from experiment on ultrasonic attenuation / M. N. Sarychev, W. A. L. Hosseny, A. S. Bondarevskaya, I. V. Zhevstovskikh, A. V. Egranov, O. S. Grunskiy, V. T. Surikov, N. S. Averkiev, V. V. Gudkov // J. Alloys Compd. – 2020. – 848. – С. 156167
4. Sarychev, M. N. Adiabatic potential energy surface of the Jahn-Teller complexes in SrF2:Cr2+ crystal / M. N. Sarychev, W. A. L. Hosseny, A. S. Bondarevskaya, G. S. Shakurov, V. A. Ulanov, V. T. Surikov, I. V. Zhevstovskikh, N. S. Averkiev, V. V. Gudkov // AIP Conference Proceedings. – 2020. – 2313. – С. 030071

ИМПУЛЬСНАЯ КАТОДОЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОРОШКООБРАЗНОГО ОКСИНИТРИДА АЛЮМИНИЯ AlON:V

Пастухов Д.А.[1], Ищенко А. В.[1], Скворцова Л.Г.[2, 3], Ахмадуллина Н.С.[2]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
[2)] Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, Москва, Россия
[3)] МИРЭА – Российский технологический университет, Москва, Россия
E-mail: a-v-i@mail.ru

PULSED CATHODOLUMINESCENCE AND OPTICAL PROPERTIES OF POWDERED AlON:V

Pastukhov D.A.[1], Ishchenko A. V.[1], Skvortsova L.G.[2, 3], Akhmadullina N.S.[2]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia
[2)] A.A. Baikov Institute of Metallurgy and Materials Science of Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia
[3)] MIREA – Russian Technological University, Moscow, Russia

In this study, AlON:V samples were synthesized by annealing mixtures of aluminum oxide, aluminum nitride, and vanadium oxide powders at 1750°C for 2 hours. The PCL, optical absorption, and optical reflectance spectra were recorded. Band gap values for all samples were estimated using the Tauc method

В настоящее время оксинитрид алюминия (AlON) вызывает сильный интерес со стороны исследователей из-за хороших оптических и механических свойств [1-2], которые можно изменять, добавляя ионы редкоземельных элементов и переходных металлов, варьируя их мольные доли. Вследствие этого открывается широкий спектр применения AlON: от бронированных стёкол для военной техники до эффективных люминофоров для источников белого света.

Целью исследования являлось изучение оптических и катодолюминесцентных свойств ранее не описанных в литературе порошков оксинитрида алюминия, легированных ионами ванадия AlON:V.

В работе исследовалась серия порошкообразных образцов AlON:V с концентрацией ванадия 0.01, 0.05, 0.1, 0.2, 0.5, 1, 2.5 и 5 ат.%. Образцы были приготовлены методом кратковременного высокотемпературного обжига смесей порошков оксида алюминия, полученного золь-гель методом из изопропоксида алюминия, нитрида алюминия и оксида ванадия (V).

Измерение спектров оптического отражения и поглощения производилось при комнатной температуре на спектрофотометре Shimadzu UV-2450 с интегрирующей сферой ISR-2200 в диапазоне длин волн 190-900 нм. Спектры поглощения для всех образцов были модифицированы с учетом наблюдаемых дополнительных полос вблизи края поглощения и обработаны по методу Тауца

для оценки ширины запрещенной зоны Eg. Спектры импульсной катодолюминесценции (ИКЛ) измерялись на установке КЛАВИ-Р. Возбуждение образцов осуществлялось импульсным катодным пучком с энергией 150 кэВ, длительностью импульса 2 нс и плотностью тока 150 А/см^2. Спектры ИКЛ регистрировали в диапазоне 350–850 нм при комнатной температуре. Для серии образцов была построена зависимость интегральной интенсивности ИКЛ от концентрации примеси ванадия.

В спектрах оптического поглощения в области 210-230 нм наблюдается край фундаментального поглощения, а также полоса при 260 нм. В диапазоне длин волн 300-850 нм имеется тенденция к постепенному снижению показателя поглощения. По результатам измерений показано, что увеличение концентрации примеси V приводит к увеличению ширины запрещенной зоны образца с 5.82 до 5.94 эВ.

В спектрах ИКЛ (рисунок 1) обнаружено две полосы свечения с максимумами при 500 и 605 нм, а также слабая полоса при 760 нм. Для образцов с концентрацией ванадия более 0.1 ат. % наблюдается резкое снижение интенсивности всех полос люминесценции. При этом зависимость интегральной интенсивности ИКЛ от концентрации ванадия имеет сложную форму. Обсуждается природа наблюдаемых полос свечения.

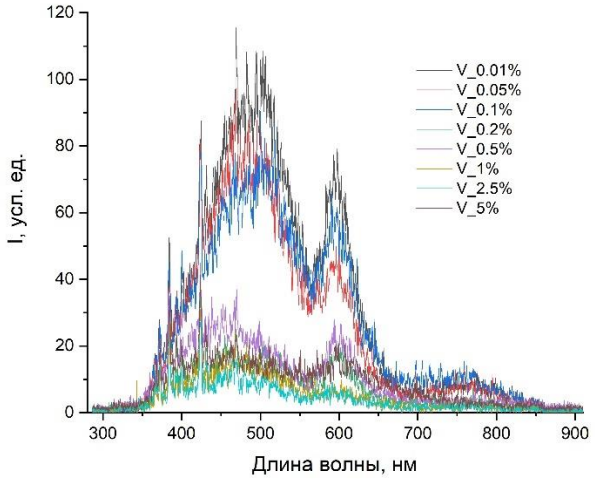


Рис. 1. Спектры ИКЛ серии образцов AlON:V

Авторы выражают благодарность Российскому научному фонду за финансовую поддержку работы (проект №22-23-00958).

1. Xian Zhang, Sen Gao, Zhao Li, Honglei Zhao, Qingfeng Zeng, Ceramics International, 45, 7778, (2019)
2. Liang-Jun Yin, Wei-Wei Hu, Xin Xu, Lu-Yuan Hao, Ceramics International, 39, 2601, (2013)

СИНТЕЗ, ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРЫ, ЭЛЕКТРО- И МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЯ МОНО- И ПОЛИКРИСТАЛЛА $MnBi_2Te_4$

Перевалова А.Н.[1], Фоминых Б.М.[1, 2], Наумов С.В.[1], Марченкова Е.Б.[1], Марченков В.В.[1, 2]

[1)] Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

[2)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: domozhirova@imp.uran.ru

SYNTHESIS, FEATURES OF STRUCTURE, ELECTRO- AND MAGNETORESISTIVITY OF $MnBi_2Te_4$ MONO- AND POLYCRYSTAL

Perevalova A.N.[1], Fominykh B.M.[1, 2], Naumov S.V.[1], Marchenkova E.B.[1], Marchenkov V.V.[1, 2]

[1)] M.N. Mikheev Institute of Metals Physics, UB RAS, Ekaterinburg, Russia

[2)] Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia

A single crystal and a polycrystal of an antiferromagnetic topological insulator $MnBi_2Te_4$ have been grown. The structure, electro- and magnetoresistivity of the obtained materials have been studied in detail at temperatures from 2 to 300 K and in magnetic fields up to 9 T.

В последние годы большой интерес как с точки зрения фундаментальной науки, так и благодаря многообещающим перспективам практического применения привлекают топологические материалы. К таким материалам относят топологические изоляторы и топологические полуметаллы. Отличительной особенностью топологических изоляторов является наличие энергетической щели в их объеме и бесщелевых состояний с линейным законом дисперсии на поверхности, которые возникают благодаря инверсии зон в объеме и защищены симметрией по отношению к обращению времени. В частности, к таким материалам относят соединения Bi_2Se_3 и Bi_2Te_3, теоретическим и экспериментальным исследованиям которых посвящено в настоящее время достаточно большое число работ (см., например, работу [1] и ссылки в ней). Известно, что взаимодействие нетривиальной топологии электронной зонной структуры и магнетизма может привести к реализации необычных квантовых состояний в конденсированных средах [2]. В связи с этим в настоящее время большое внимание исследователей сосредоточено на поиске и изучении магнитных топологических материалов. Одним из таких материалов является обнаруженный недавно антиферромагнитный топологический изолятор $MnBi_2Te_4$ [3]. Следовательно, синтез, изучение структуры и электронных транспортных свойств данного соединения представляют большой интерес, в частности, интересно сравнить транспортные свойства моно- и поликристаллических образцов $MnBi_2Te_4$. Целью данной работы является

синтез, исследование особенностей структуры, электро- и магнитосопротивления моно- и поликристаллов $MnBi_2Te_4$.

Монокристалл $MnBi_2Te_4$ был выращен согласно методике, схожей с методом кристаллизации из раствора в расплаве. Поликристалл $MnBi_2Te_4$ синтезирован из стехиометрической смеси элементов. Аттестация структуры синтезированных материалов проводилась методами рентгеновского дифракционного анализа, сканирующей электронной микроскопии и рентгеновского энергодисперсионного микроанализа. Электро- и магнитосопротивление измерены по четырехконтактной методике в диапазоне температур от 2 до 300 К и в магнитных полях до 9 Тл. Исследована анизотропия сопротивления монокристалла $MnBi_2Te_4$. Установлено, что сопротивление, измеренное перпендикулярно плоскости (00l) исследуемого монокристалла, на порядок величины превышает сопротивление, измеренное в плоскости (00l). Показано наличие пика при температуре ~25 К, соответствующего температуре Нееля, на температурных зависимостях электросопротивления как моно-, так и поликристаллического $MnBi_2Te_4$. Данный пик наблюдается также в поле 1 Тл, однако исчезает в магнитных полях выше 5 Тл, что согласуется с результатами работы [4] и, по-видимому, связано с магнитным фазовым переходом в ферромагнитное состояние под действием внешнего магнитного поля выше 5 Тл.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «Спин», № 122021000036-3) при частичной поддержке стипендии Президента РФ молодым ученым и аспирантам (СП-2705.2022.1).

1. Qi X.L., Zhang S.C., Rev. Mod. Phys. 83, 1057–1110 (2011).
2. Bernevig B.A., Felser C., Beidenkopf H., Nature 603, 41–51 (2022).
3. Otrokov M.M., Klimovskikh I.I., Bentmann H. et al., Nature 576, 416–422 (2019).
4. Lee S.H., Zhu Y., Wang Y. et al., Phys. Rev. Res. 1, 012011(R) (2019).

ТЕМПЕРАТУРНАЯ СТАБИЛЬНОСТЬ КВАНТОВЫХ ПРОВОДНИКОВ В НАНОТУБУЛЯРНОМ ДИОКСИДЕ ЦИРКОНИЯ

Петренёв И.А.[1], Вохминцев А.С.[1], Мартемьянов Н.А.[1], Камалов Р.В.[1], Вайнштейн И.А.[1, 2]

[1)] Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия

[2)] Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: i.a.petrenev@urfu.ru

THERMAL STABILITY OF QUANTUM CONDUCTIVE FILAMENTS IN NANOTUBULAR ZIRCONIA

Petrenyov I.A.[1], Vokhmintsev A.S.[1], Martemyanov N.A.[1], Kamalov R.V.[1], Weinstein I.A.[1, 2]

[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

[2)] Institute of Metallurgy of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia

Resistive memory cells based on a 1.7 μm thick zirconia nanotubular layer were fabricated. Conductance quantization was shown due to the formation of quantum filaments consisting of oxygen vacancies. The rupture of filaments was observed at 75 °C temperature.

В настоящее время диоксид циркония ZrO_2 активно используется во множестве областей науки и техники, таких как твердотельная дозиметрия ионизирующих излучений, катализ, фотоника и наноэлектроника. Например, в последнем случае ZrO_2 служит основой ячеек резистивной памяти благодаря большому диапазону изменения сопротивлений ($> 10^6$) [1], низкому уровню потребления энергии, высоким характеристикам надёжности и устойчивости (> 2000 циклов и > 30 суток работы) [2]. Кроме того, в нанотубулярных массивах ZrO_2 показана возможность формирования квантовых проводящих состояний [3]. Известно, что время жизни квантовых проводников при комнатной температуре в мемристивных структурах на основе тонких слоёв оксидов ограничено десятками минут [4]. В данной работе исследовано влияние температуры на стабильность квантовых проводящих каналов в мемристивной сэндвич-структуре на основе нанотрубок диоксида циркония.

Нанотрубки ZrO_2 длиной 1.7 мкм получены методом контролируемого анодного окисления металлического циркония в содержащем фтор электролите [5]. Золотые электроды толщиной 50 нм и диаметром 140 мкм наносились на массив ZrO_2 магнетронным способом через маску. Электрическая проводимость G полученных мемристоров $Zr/ZrO_2/Au$ определялась из экспериментальных вольт-амперных характеристик (ВАХ), измеренных на микрозондовой станции Cascade Microtech MPS150 с нагревательным столиком и управляемым

модульным блоком питания PXIe-4143. Zr-подложка заземлялась, а управляющий сигнал подавался на Au-контакты.

Измерены ВАХ изготовленных сэндвич-структур $Zr/ZrO_2/Au$ в диапазоне температур T = 20–100 °C при приложении электрического сигнала положительной и отрицательной полярностей в квазистатическом и импульсном режимах. Продемонстрировано наличие квазистабильных проводящих состояний исследуемых мемристоров, кратных целым и полуцелым значениям кванта проводимости $G_0 \approx 77.5$ мкСм при увеличении температуры. Показано, что сформированные квантовые проводники стабильны при T < 75 °C (рис. 1). При дальнейшем нагреве происходит их постепенное разрушение вплоть до полного перехода структуры в состояние с высоким сопротивлением. Таким образом, реализовано переключение между стабильными резистивными состояниями мемристоров в направлении уменьшения проводимости.

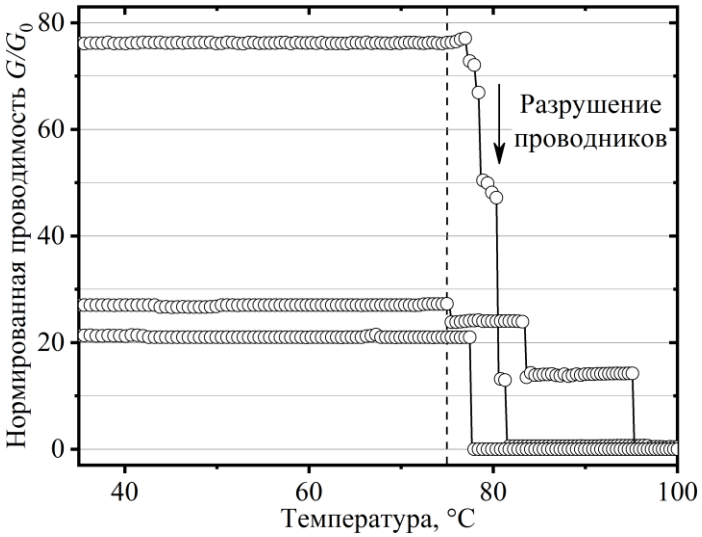


Рис. 1. Зависимости нормированной проводимости G/G_0 от температуры T для мемристоров $Zr/ZrO_2/Au$

На основе выполненных температурных исследований ВАХ мемристоров $Zr/ZrO_2/Au$ подтверждена квантовая природа создаваемых проводящих каналов, а также расширена модель [3] процессов формирования и разрушения квантовых проводников в нанотрубках ZrO_2 с участием кислородных вакансий.

Работа выполнена при поддержке научного проекта Минобрнауки FEUZ-2023-0014

1. W. Guan, S. Long, Q. Liu, M. Liu, W. Wang, IEEE Electron Device Letters, 29, 434 (2008).
2. M.U. Khan, G. Hassan, J. Bae, Applied Physics A, 125, 378 (2019).
3. A.S. Vokhmintsev, I.A. Petrenyov, R.V. Kamalov, I.A. Weinstein, Nanotechnology, 33, 075208 (2022).

4. G. Milano, M. Aono, L. Boarino, U. Celano, T. Hasegawa, M. Kozicki, S. Majumbar, M. Menghini, E. Miranda, C. Ricciardi, S. Tappertzhofen, K. Terabe, I. Valov, Advanced Materials, 34, 2201248 (2022).
5. I.A. Petrenyov, R.V. Kamalov, A.S. Vokhmintsev, N.A. Martemyanov, I.A. Weinstein, Journal of Physics: Conference Series, 1124, 022004 (2018).

ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ СИНТЕЗА НА ХАРАКТЕРИСТИКИ РАДИАЦИОННО-ИНДУЦИРОВАННОГО СИГНАЛА ЭПР ИСКУССТВЕННОГО ГИДРОКСИАПАТИТА

Подшивалов А.П.[1], Байтимиров Д.Р.[1], Конев С.Ф.[1], Иванов Д.В.[1], Слесарев Г.П.[1]
[1)] Уральский Федеральный Университет, Екатеринбург, Россия
E-mail: a.p.podshivalov@urfu.ru

DEPENDENCE OF THE CHARACTERISTICS OF THE RADIATION-INDUCED EPR SIGNAL OF ARTIFICIAL HYDROXYAPATITE ON THE SYNTHESIS CONDITIONS

Podshivalov A.P.[1], Bajtimirov D.R.[1], Konev S.F.[1], Ivanov D.V.[1], Slesarev G.P.[1]
[1)] Ural Federa University, Yekaterinburg, Russia

In this work, we studied the effect of synthesis conditions (pH) and annealing of artificial HA samples on the sensitivity to IR irradiation. It is shown that the most promising synthesis conditions for dosimetric studies of artificial HA are solution pH 8.6 and subsequent annealing at T = 700°C.

Известно, что регистрация радиационно-индуцированных парамагнитных центров в природном гидроксиапатите (ГА), входящем в состав зубной эмали, методом ЭПР является высокочувствительным и надежным способом ретроспективной реконструкции дозы. Однако биологический гидроксиапатит при использовании в качестве дозиметра имеет ряд недостатков –как получение дозиметрического материала, так и подготовка и аттестация дозиметров, особенно в больших количествах. Использование синтезированного ГА позволит нивелировать влияние указанных негативных факторов при серийном производстве ЭПР-дозиметров; однако необходимо подобрать такие условия синтеза, чтобы синтезированный ГА приближался по своей чувствительности к природному, либо превосходил его.

Целью данной работы являлось исследование влияния условий синтеза (pH раствора исходных компонентов, меняющийся в диапазоне 6 ÷ 9) и отжига (T=700 °C) образцов искусственного ГА на чувствительность к облучению ИИ в диапазоне доз от 10 до 40 кГр.

Ранее нами было показано [1], что при облучении образцов искусственного ГА наблюдается характерный радиационно-индуцированный сигнал ЭПР с анизотропным g-фактором (рис. 1), схожий по форме со спектрами, наблюдаемыми в образцах зубной эмали.

В результате проведенного исследования обнаружено, что значение pH при синтезе влияет на форму и амплитуду радиационно-индуцированного сигнала. Величина расщепления линии ЭПР (ΔH), обусловленного наличием

параллельной и перпендикулярной компонент аксиального g-фактора, линейно уменьшается с ростом pH (рис. 2). Данное поведение может характеризовать изменение структуры кристалла синтезированного ГА, связанное пропорционально с объемом ортофосфорной кислоты, используемой при синтезе образцов. Помимо этого, ЭПР отклик искусственного ГА на облучение максимален для образца с pH = 8,6. При этом облученный образец демонстрирует достаточно высокую чувствительность к ИИ, всего лишь в четыре раза меньшую, чем природный гидроксиапатит зубной эмали.

Предварительное прокаливание образцов синтезированного ГА при температуре 700 °C приводит к росту количества радиационно-индуцированных парамагнитных центров при последующем облучении приблизительно в два раза во всем диапазоне доз от 10 до 40 кГр относительно образцов синтезированного ГА до отжига (рис. 3). При этом величина амплитуды сигнала ЭПР отожженного образца не демонстрирует насыщения вплоть до 40 кГр.

В результате данной работы показано, что условиями для синтеза перспективного для дальнейших дозиметрических исследований искусственного ГА является pH раствора 8,6 и последующий отжиг при T = 700 °C.

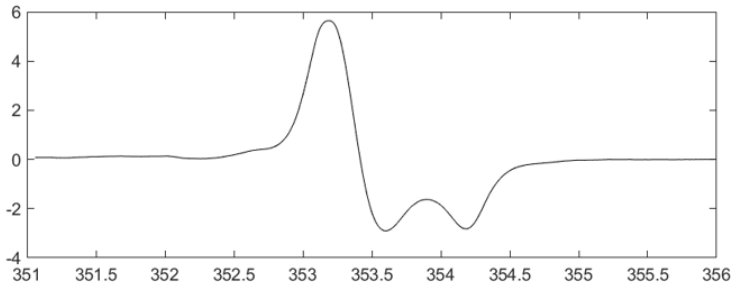


Рис. 1. Характерный спектр синтезированного гидроксиапатита после воздействия ИИ

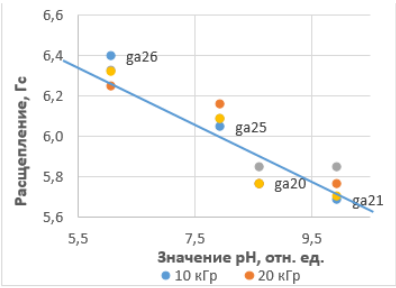


Рис. 2. Зависимость расщепления сигнала ЭПР образцов искусственного гидроксиапатита в зависимости от pH.

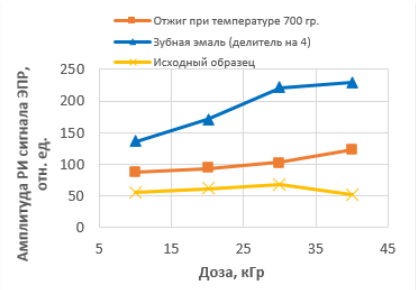


Рис. 3. Зависимость амплитуды радиационно-индуцированного сигнала ЭПР образца искусственного гидроксиапатита, отожженного при температуре 700 °C, в зависимости от дозы.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (базовая часть государственного задания, проект № FEUZ-2023-0013)

The work was partially supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (through the basic part of the government mandate, project No. FEUZ-2023-0013).

1. Д.В.Иванов, Д.Р.Байтимиров, Г.П.Слесарев, В.Е.Наугольных, С.Ф.Конев. Радиационные свойства синтезированного при различных условиях гидроксиапатита // IX Международная молодежная научная конференция «Физика. Технологии. Инновации» (ФТИ-2022), Екатеринбург, 16-20 мая, 2022: Тез.докл.-Екатеринбург:УРФУ.- 201 с.

МАГНИТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДВУХСЛОЙНЫХ КОМПОЗИТОВ MZF − PZT/EPOXY И MZF − PZT

Пресняков А.Л.[1]
[1)] Воронежский государственный технический университет, г. Воронеж, Россия
E-mail: artem-presnyakov@list.ru

MAGNETOELECTRIC PROPERTIES OF MZF − PZT/EPOXY AND MZF − PZT TWO-LAYER COMPOSITES

Presnyakov A.L.[1]
[1)] Voronezh State Technical University, Voronezh, Russia

Under different experimental conditions, magnetoelectric properties of two-layer composites based on manganese zinc ferrite and lead zirconate titanate piezoceramics were studied.

При разных частотах переменного магнитного поля, напряженностях постоянного магнитного поля и объемных долях пьезоэлектрика [пьезокерамики системы цирконат-титанат свинца (PZT) и смесевого пьезоэлектрического композита PZT/Epoxy, где Epoxy − эпоксидный компаунд] исследованы магнитоэлектрические (МЭ) свойства двухслойных композитов, изготовленных как склеиванием эпоксидным компаундом пластин марганец-цинкового феррита (MZF) и PZT/Epoxy (MZF − PZT/Epoxy), так и склеиванием эпоксидным компаундом пластин MZF и PZT (MZF − PZT). Целью таких исследований являлось установление возможности усиления МЭ-свойств композитов путем выбора пьезоэлектрической компоненты с большим отношением пьезоэлектрического модуля к диэлектрической проницаемости.

Магнитоэлектрические свойства композитов MZF − PZT/Epoxy и MZF − PZT изучали путем помещения образцов в переменное и постоянное магнитные поля с последующей регистрацией электрического напряжения, генерируемого на металлических обкладках пьезоэлементов, а для их характеристики использовали МЭ-коэффициент по напряжению, определяемый как отношение электрического напряжения к произведению толщины пьезоэлемента на напряженность переменного магнитного поля. При этом магнитные поля были направлены по длине образцов, поскольку МЭ-коэффициент при взаимно перпендикулярном расположении векторов намагниченности и электрической поляризации (поперечный МЭ-коэффициент) превышает МЭ-коэффициент при взаимно параллельном расположении векторов намагниченности и электрической поляризации (продольный МЭ-коэффициент) [1].

Основные результаты, полученные в работе:

1. На частотах, стремящихся к частоте резонанса, МЭ-коэффициенты композитов MZF − PZT/Epoxy и MZF − PZT существенно возрастают, что

происходит вследствие резкого увеличения упругих деформаций образцов. Пик на частотных зависимостях МЭ-коэффициентов приходится на резонансную частоту 1-й гармоники продольных колебаний по длине образца.

2. Зависимости МЭ-коэффициентов от напряженности постоянного магнитного поля и МЭ-коэффициентов от объемной доли пьезоэлектрика при резонансной частоте имеют максимум, который находится в качественном согласии с выводами теории МЭ-эффекта, основанной на методе эффективных параметров гетерогенной среды.

3. Сравнение МЭ-коэффициентов композитов на основе PZT/Epoxy с отношением пьезоэлектрического модуля к диэлектрической проницаемости 0,09 и композитов на основе PZT с отношением пьезоэлектрического модуля к диэлектрической проницаемости 0,06 выявило корреляцию между МЭ-коэффициентом и отношением пьезоэлектрического модуля к диэлектрической проницаемости для пьезоэлектрика. Наибольший МЭ-коэффициент 84 (мВ·см)/Э был обнаружен для образца MZF − PZT/Epoxy при объемной доле пьезоэлектрика 0,67, напряженности переменного магнитного поля 5 Э, напряженности постоянного магнитного поля 220 Э, резонансной частоте 193,76 кГц и температуре 293 К.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования в рамках государственного задания (FZGM-2023-0006).

1. А. В. Калгин. ФТТ 63, 888–893 (2021).

ТЕРМОЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ Ga_2O_3 , ОБЛУЧЕННОГО ВЫСОКОДОЗНЫМ ИМПУЛЬСНЫМ ЭЛЕКТРОННЫМ ПУЧКОМ

Прытков Д.И.[1], Никифоров С.В.[1], Лисицын В.М.[2], Голковский М.Г.[3]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Томский политехнический университет, г. Томск
[3)] Институт ядерной физики, СО РАН, г. Новосибирск
E-mail: danlaq.pr@gmail.com

THERMOLUMINESCENCE OF Ga_2O_3 IRRADIATED BY HIGH-DOSE PULSED ELECTRON BEAM

Prytkov D.I.[1], Nikiforov S.V.[1], Lisitsyn V.M.[2], Golkovsky M.G.[3]
[1)] Ural Federal University named after the First President of Russia B.N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia
[2)] Tomsk Polytechnic University, Tomsk
[3)] Institute of Nuclear Physics, SB RAS, Novosibirsk

The TL curves of pure gallium oxide ceramics synthesized in a stream of fast electrons are studied. It is established that the TL curve is the sum of two peaks with activation energies of 0.84 and 0.95 eV. The nature of the dose characteristics of the TL of the studied material is analyzed.

Оксид галлия (Ga2O3) является широкозонным полупроводником (Eg = 4.8 eV), что обусловливает его использование в различных областях науки и техники в условиях высоких температур, повышенных напряжений и интенсивных радиационных полей [1]. Оксид галлия востребован при разработке детекторов УФ-диапазона, изоляционных материалов в составе микросхем, конденсаторных структур и т.д.

Метод термолюминесценции (ТЛ) является одним из самых распространенных способов измерения поглощенных доз ионизирующих излучений, в частности, высокодозных импульсных электронных пучков (1-100 кГр) [2]. Целью данной работы являлся анализ ТЛ свойств керамик Ga_2O_3 , полученных в потоке высокоэнергетических электронов, и оценка возможностей их применения для дозиметрии импульсных электронных пучков. Для синтеза керамик шихта, содержащая порошок номинально чистого оксида галлия, подвергалась облучению электронами с энергией 1.4 МэВ и плотностью мощности 19 kW/cm^2 от ускорителя ЭЛВ-6 (ИЯФ СО РАН, г. Новосибирск). Для возбуждения ТЛ керамики Ga_2O_3 облучались импульсным электронным пучком ускорителя «РАДАН-ЭКСПЕРТ» (60 A/cm^2, 2 ns, 130 keV). Доза облучения составляла 1.5 kGy на один импульс.

Для того, чтобы устранить влияние мелких ловушек, затрудняющих измерение параметров дозиметрического пика при 150 ^{o}C, были выбраны

оптимальные температурно-временные условия измерения ТЛ (выдержка 5минут при 50 ºC после облучения).

Обнаружено, что дозиметрический пик ТЛ представляет собой суперпозицию двух элементарных пиков при температурах 137 ºC и 179 ºC (скорость нагрева 2 ºC/s). Установлено, что энергии активации ТЛ указанных пиков составляют 0.84 и 0.95 eV. Также обнаружено, что светосумма исследуемых пиков не зависит от скорости нагрева образцов, что указывает на отсутствие процессов температурного тушения ТЛ в исследуемом диапазоне.

В работе обсуждаются также дозовые зависимости интенсивности ТЛ обсуждаемых пиков и анализируются перспективы применения исследуемого материала в высокодозной ТЛ дозиметрии.

1. С.В. Никифоров, В.С. Кортов, Радиационно-индуцированные процессы в широкозонных нестехиометрических оксидных диэлектриках, ТЕХНОСФЕРА, (2017)
2. M.Islam, D.Rana, A.Hernandez, Study of trap levels in β-Ga_2O_3 by thermoluminescence spectroscopy, (2019)

NATURE OF INTERLAYER BONDS IN TWO-DIMENSIONAL DITELURIDES

Pushkarev G.V.[1], Mazurenko V. G.[1], Mazurenko V. V.[1], Bukhvalov D. V.[1, 2]
[1)] Department of Theoretical Physics and Applied Mathematics, Ural Federal University, 620002 Ekaterinburg, Russia
[2)] College of Science, Institute of Materials Physics and Chemistry, Nanjing Forestry University, Nanjing, PR China
E-mail: puskarev.g.v@gmail.com

In our work, by using first-principles calculations we perform a systematic study of the interlayer bonds and charge redistribution of ditelurides ($NiTe_2$, $PdTe_2$, $PtTe_2$). Our results demonstrate, that bonds in ditelurides can be assiosiated with so-called dative chemical bonds between layers.

So-called van der Waals heterostructures constructed from various monolayer are also considered as key materials with multiple prospective applications almost in all areas. Results obtained in experimental studies [1] demonstrate a significant influence of the number and quality of subsurface layers on chemical activity of surface of few–layer graphene systems and other 2D materials. Therefore, significance of bonds between the neighbouring layers is essential for understanding of physical and chemical properties of these structures and further intelligent design of novel layered material.

The simulations of atomic and electronic structure of all considered materials were carried out within Density Functional Theory (DFT) framework implemented in the Vienna ab-initio simulation package (VASP) [2]. We also included van der Waals interaction using the method of Grimme (DFT-D3) [3]. These first-principles results were used for estimation of the binding energy:

$E_b=E_m-E_b/n$

where E_m and E_b are the total energies of monolayer and bulk supercells, correspondingly. n denotes the number of layers in the unit cell used to simulate the bulk phase. To quantitatively estimate the charge redistribution corresponding to formation of the bulk structure from the individual monolayers we have calculated the charge density difference defined as:

$\Delta\rho=\rho_b-\mathrm{sum}_i^n(\rho_i)$

Here ρ_b corresponds to the electron density of the supercell having periodic boundary conditions, containing several layers and representing the bulk crystal. In turn, ρ_i is the electron density of the i-th monolayer isolated from the rest of the supercell.

Results of our simulations demonstrate that ditelurides (NiTe2,PtTe2, PdTe2) characterized by comparably long distance of the ionic radii of cations, which makes possible additional coordination of metal centers by orbitals of cations belonging to other layer. What is being implemented by values of E_b are larger than 600 meV and

close to those estimated for the bonds in systems with coordination (also called dative) bonds [4] between metal centres and ligands or molecule. As the result so-called dative or coordination chemical bonds between neighbouring layers are formed in ditelurides. Such a coordination types of the interlayer bonds leads to visible changes in electronic structure of ditelurides within monolayer/bulk transition. Interlayer bonds are responsible for amplifying three-dimensional character of inter-atomic couplings in these systems. The same coordination-like inter-layer interactions also contribute to the formation of unsaturated chemical bonds on the surface, which explains experimentally observed chemical instability of ditelurides. Redistribution of the charge density upon formation of coordination interlayer bonds can be the key to understanding of charge density waves observed in multiple dichalcogenides.

This work was supported by the Russian Science Foundation Grant 21-72-10136.

1. Liu, L.; Ryu, S.; Tomasik, M. R.; Stolyarova, E.; Jung, N.; Hybertsen, M. S.; Steigerwald, M. L.; Brus, L. E.; Flynn, G. W. Graphene Oxidation: Thickness-Dependent Etching and Strong Chemical Doping. Nano Letters 2008, 8, 1965–1970.
2. Kresse, G.; Furthm¨uller, J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. Phys. Rev. B 1996, 54, 11169–11186.
3. Grimme, S.; Antony, J.; Ehrlich, S.; Krieg, H. A consistent and accurate ab initio parametrization of density functional dispersion correction (DFT-D) for the 94 elements H-Pu. The Journal of Chemical Physics 2010, 132, 154104.
4. Muller, P. Glossary of terms used in physical organic chemistry (IUPAC Recommendations 1994). Pure and Applied Chemistry 1994, 66, 1077–1184.

ВЛИЯНИЕ ПРЕКУРСОРА ИОНОВ КАДМИЯ НА СТАБИЛЬНОСТЬ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОЧАСТИЦ СУЛЬФИДА КАДМИЯ В ВОДНОМ РАСТВОРЕ

Путилова В. Д.[1], Попов И.Д.[2], Кузнецова Ю.В.[2]
[1)] Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Институт химии твердого тела Уральского отделения РАН, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: v.d.putilova@gmail.com

THE EFFECT OF A PRECURSOR OF CADMIUM IONS ON THE STABILITY AND OPTICAL PROPERTIES OF CADMIUM SULFIDE NANOPARTICLES IN AQUEOUS SOLUTION

Putilova V.D.[1], Popov I.D.[2], Kuznetsova Yu.V.[2]
[1)] Ural Federal University, Ekaterinburg, Russian Federation
[2)] Institute of Solid State Chemistry, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russian Federation

The effect of the precursors on the stability and luminescence of CdS nanoparticles capped by EDTA in an aqueous solution is reported.

Несмотря на долгую историю исследований, наноразмерный сульфид кадмия (CdS) и в настоящее время привлекает значительное внимание. Наночастицы сульфида кадмия обладают уникальными свойствами: интенсивная люминесценция, непрерывный спектр возбуждения, контролируемое положение полос излучения, широкая запрещенная зона, высокая фотостабильность. Такие свойства позволяют применять их в оптоэлектронике [1], биологии и медицине[2]. Ввиду значительного разнообразия потенциальных областей применения наночастиц CdS, определение влияния условий синтеза на их структурные и оптические параметры является актуальной задачей. Цель данного исследования – установить влияние прекурсора ионов кадмия на стабильность коллоидных растворов с наночастицами CdS.

В данной работе наночастицы CdS были синтезированы методом химической конденсации в водном растворе. В качестве стабилизатора использовали динатриевую соль этилендиаминтетрауксусной кислоты (ЭДТА, Трилон-Б) $C_{10}H_{14}N_2O_8Na_2$ (Na_2H_2Y), которая обеспечивала долговременную стабильность получаемых растворов наночастиц [3, 4]. Соотношение концентраций ионов исходных компонентов было использовано [Cd:ЭДТА: S] = 1:1:1. В качестве прекурсора ионов кадмия использовали сернокислый кадмий ($CdSO_4$), азотнокислый кадмий ($Cd(NO_3)_2$) и хлористый кадмий ($CdCl_2$), в качестве источника ионов серы использовали сернистый натрий (Na_2S).

Размер и дзета-потенциал наночастиц CdS в растворе были изучены методом динамического рассеяния света (ДРС) на приборе Zetasizer Nano ZS (Malvern

Instruments Ltd.) при 25 °C. Спектры оптического поглощения и люминесценции были получены методами оптической абсорбционной и люминесцентной спектроскопии на спектрометре FS5 (Edinburgh Instruments). Ширина запрещённой зоны была определена по спектрам оптического поглощения методом Тауца.

Независимо от прекурсора ионов кадмия получили стабильные коллоидные растворы наночастиц CdS. Значение дзета-потенциала изменялось от |20| до |30| мВ, гидродинамический диаметр от 17.5 до 57 нм. Полученные образцы обладают люминесценцией в области длин волн 400-850 нм. Наименьший диаметр и наибольший дзета-потенциал были получены с использованием сернокислого кадмия в качестве прекурсора.

Работа выполнена по государственному заданию ИХТТ УрО РАН.

1. B.Gao, X. Zhao. Analytical Chemistry 93(2), 820-827 (2020)
2. R. Harish, K. D. Nisha. Applied Surface Science 499, 143817 (2020)
3. Y. V. Kuznetsova, A. A. Rempel. Inorganic Materials 51 3, 215-219 (2015)
4. С.В. Рempель, Н.С. Кожевникова, Н.Н. Александрова, А.А. Рempель. Неорганические Материалы 47 3, 271–275 (2011)

ИЗМЕНЕНИЕ ФОРМЫ КОЛЛЛОИДНЫХ НАНОЧАСТИЦ, СОЗДАННЫХ ЛАЗЕРНОЙ АБЛЯЦИЕЙ ЦИНКА В ВОДЕ

Рахматова Р.Р.[1], Пряхина В.И.[1]
[1)] Институт естественных наук и математики, Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия
E-mail: regisharr@mail.ru

SHAPE TRANSFORMATION OF COLLOIDAL NANOPARTICLES, PRODUSED BY LASER ABLATION OF ZINC IN WATER

Rakhmatova R.R.[1], Pryakhina V.I.[1]
[1)] Institute of Natural Sciences and Mathematics, Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

We investigated the growth of zinc-based colloidal nanoparticles. The initial nanoparticles were produced by laser ablation of bulk Zn target in water. Rods grew in the colloid as a result of the long heating up to 90 °C. Plates formed during the long liquid-air interaction at ambient conditions.

Материалы на основе оксида цинка, обладающего уникальными физическими и химическими свойствами и биосовместимостью, используются для широкого круга применений [1]. Синтез наночастиц различной морфологии привлекает внимание, т.к. изменение формы может оказывать существенное влияние на свойства наноструктур и, тем самым, расширять возможности их применения. Контроль размеров и формы наночастиц доступен при синтезе методом лазерной абляции в жидкости, который может использоваться для создания кристаллических наночастиц, способных к ориентированному росту [2,3].

Исследовалось изменение формы наночастиц в коллоидном растворе, созданном в результате сканирования помещенной в жидкость металлической мишени Zn (99,99 %) излучением импульсного волоконного Yb-лазера с использованием сканирующей системы MiniMarker-M20 (длина волны 1064 нм, длительность импульса 100 нс, мощность до 20 Вт).

Для исследования морфологии и состава наночастиц капля коллоидного раствора высушивалась на гладкой кремниевой подложке. Визуализация наночастиц проводилась с помощью сканирующей электронной микроскопии (Auriga CrossBeam WorkStation, Carl Zeiss). Анализ состава проводился при помощи рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (K-Alpha+, Thermo Fisher Scientific; Al Kα, hv = 1436 eV), а также измерения спектров оптического поглощения (Cary 5000, Agilent).

В результате лазерной абляции в воде наночастицы имели неправильную форму со средним размером 35±5 нм и состав ZnO (Рис. 1a). При этом синтез в

изопропиловом спирте позволял получать наночастицы сферической формы и препятствовал их окислению (Рис. 1б). Показано, что при последующем нагреве до 90 °C в течение 1 ч водного раствора происходит рост наночастиц ZnO в виде коротких стержней сопоставимого с исходным диаметра (Рис. 1в). Длительное высыхание капли исходного водного раствора в течение (~ 1 ч) приводило к формированию пластин диаметром до нескольких сотен нанометров (Рис. 1г). Рост наночастиц в коллоидном растворе может быть объяснен за счет Оствальдовского созревания, взаимодействия на границе раздела жидкость-воздух с увеличением концентрации при длительном высыхании.

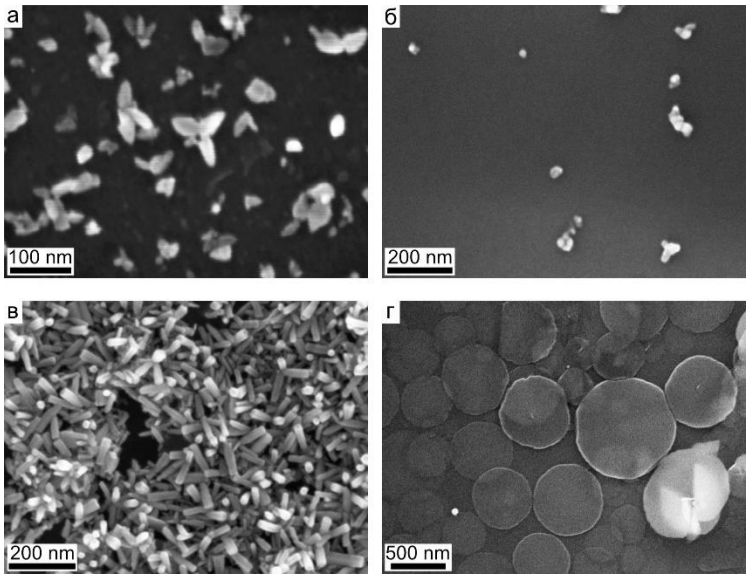


Рис. 1. Формы наночастиц цинка в результате: синтеза в (а) воде и (б) спирте; (в) нагрева коллоидного раствора, (г) длительного высыхания.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (No 21-72-00116, https://rscf.ru/project/21-72-00116), с использованием оборудования УЦКП «Современные нанотехнологии» УрФУ.

1. Kołodziejczak-Radzimska A., Jesionowski T., Zinc oxide - from synthesis to application: a review, Materials 7 2833–2881 (2014).
2. Zeng H., et al. Nanomaterials via laser ablation/irradiation in liquid: a review, Adv. Funct. Mater. 22 1333–1353 (2012).
3. Thanh N.T.K., Maclean N., Mahiddine S. Mechanisms of nucleation and growth of nanoparticles in solution, Chem. Rev. 114 7610–7630 (2014).

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ АМОРФНОЙ ФАЗЫ В МНОГОФАЗНОМ ОБРАЗЦЕ ПО ДАННЫМ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКТОМЕТРИИ

Романов Р. Р.[1], Денисова О. В.[1], Оштрах М. И.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Физико-технологический институт, 620002, Екатеринбург, Россия
E-mail: roman.target@mail.ru

THE DETERMINATION OF AMORPHOUS PHASE CONTENT IN MULTIPHASE SAMPLE BY THE X-RAY DIFFRACTION DATA

Romanov R. R.[1], Denisova O. V.[1], Oshtrakh M. I.[1]
[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia B.N.Yeltsin, Institute of Physics and Technology, 620002, Ekaterinburg, Russia

The method based on Least Square Algorithm for modeling the X-ray pattern as a sum of crystal and amorphous parts is proposed to determine the quantity of amorphous component in the pharmaceutical. It was measured at the specially prepared samples that the error of the method is less than 5%.

Методы рентгеновской дифракции позволяют не только качественно, но и количественно определять фазовый состав образца, включая аморфные компоненты [1]. Современные методики, определяющие содержание аморфной фазы, основываются на знании кристаллической структуры фаз, входящих в состав образца. Необходимыми данными о структуре различных фаз являются параметры кристаллической решетки, пространственная группа симметрии, позиции базисных атомов, которые содержатся в кристаллографической базе данных Inorganic Crystal Structure Database (ICSD). Для большинства неорганических веществ эти данные известны.

Однако, возникают задачи, связанные с изучением фазового состава образцов, например, фармацевтических препаратов, содержащих не только органические кристаллические, но и аморфные фазы. Для многих органических кристаллических соединений информация о структуре либо неизвестна, либо неполна, что резко сужает круг методов для определения доли содержащейся в этих препаратах аморфной фазы.

Целью данной работы было определение количества железосодержащей аморфной фазы в препарате Iron Complex по данным рентгеновской дифракции. Этот фармацевтический препарат, предназначенный для предотвращения железодефицитной анемии, имеет в своем составе множество органических и неорганических кристаллических фаз и аморфную фазу, которая соответствует бисглицинату железа. Для решения поставленной задачи был предложен метод, основанный на разделении вкладов в дифрактограмму от кристаллических фаз и

аморфного гало. Имея в распоряжении дифрактограмму чистого аморфного соединения, можно на основе метода наименьших квадратов рассчитать масштабный множитель, с которым аморфная компонента входит в дифрактограмму исследуемого образца. В дальнейшем, по рассчитанным массовым коэффициентам поглощения аморфной фазы и суммарному коэффициенту поглощения кристаллических фаз, можно вычислить весовое содержание аморфной компоненты, используя найденный ранее масштабный множитель.

Данный метод был опробован на искусственно созданных смесях с известным содержанием аморфной компоненты. Погрешность в определении весового процента аморфной фазы составила не более 5%. Результаты работы показали, что предложенная методика может быть применена к исследованию фармацевтических препаратов, содержащих аморфные фазы.

1. Madsen IC, Scarlett NVY, Kern A (2011). Description and survey of methodologies for the determination of amorphous content via X-ray powder diffraction. Z Kristallogr 226:944–955.

НЕЙТРОНОГРАФИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ОБРАЗЦА $LiNi_{0.25}Co_{0.75}PO_4$

Ромашко П.Е.[1, 2], Сёмкин М.А.[1, 2, 3], Дюжева-Мальцева Е.В.[3], Глазков В.П.[3]
[1)] Институт естественных наук и математики УрФУ,Екатеринбург, Россия
[2)] Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[3)] НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия
E-mail: polina.romashko.2014@mail.ru

NEUTRON INVESTIGATION OF $LiNi_{0.25}Co_{0.75}PO_4$ SAMPLE

Romashko P.E.[1, 2], Semkin M.A.[1, 2, 3], Dyuzheva-Maltseva E.V.[3], Glazkov V.P.[3]
[1)] Institute of Natural Sciences and Mathematics UrFU,Yekaterinburg, Russia
[2)] M.N. Mikheev Institute of Metal Physics of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia
[3)] National Research Center, Kurchatov Institute, Moscow, Russian Federation

The X-ray diffraction, neutron diffraction and magnetic measurements have been carried out to study the polycrystalline sample $LiNi_{0.25}Co_{0.75}PO_4$ prepared by the glycerol-nitrate synthesis method.

Соединения $Li(Ni/Co)PO_4$ интересны с прикладной точки зрения, они представляют интерес в качестве катодных материалов литий-ионных аккумуляторов. Поиск таких материалов с перспективными свойствами (повышенной проводимости) возможен с помощью процедуры легирования, оптимизации кристаллической структуры, модификации поверхности и т. п. [1]. Соединения $Li(Ni/Co)PO_4$ играют важную роль при описании остальных физико-химических свойств литиевых ортофосфатов [2].

Целью нашей работы является проведение нейтронографических измерений образца $LiNi_{0.25}Co_{0.75}PO_4$ в магнитоупорядоченном состоянии, обработка и анализ полученных данных.

Поликристаллический образец $LiNi_{0.25}Co_{0.75}PO_4$ был получен глицерин-нитратным методом синтеза. Выполнена его рентгеноструктурная аттестация и проведены измерения его макроскопических свойств. Нейтронографические измерения выполнены на станции нейтронной порошковой дифракции ДИСК на длине волны нейтронов $\lambda = 2.43805$ Å в интервале температур от 10 К до 22 К (см. Рисунок 1). Обработка нейтронографических данных выполнена полнопрофильным методом Ритвельда в пакете программ Fullprof Suite, визуализация кристаллической и магнитной структуры – в программе VESTA.

Кристаллическая структура соединений $LiNi_{1-x}Co_xPO_4$ описывается орторомбической пространственной группой Pnma. Ионы Li занимают позицию 4a с координатами (0; 0; 0), ионы Ni/Co и P занимают позиции 4c (x; 1/4; z), а ионы O расположены в двух узлах 4c и позиции 8d (x; y; z). Основное магнитное состояние соединений $LiNi_{1-x}Co_xPO_4$ характеризуется антиферромагнитным

упорядочением ионов 3d-переходного металла при температурах ниже 21 К и ориентацией магнитных моментов вдоль оси c, величиной магнитного момента 2.2 $\mu_Б$ – для состава x = 0, и вдоль оси b и величиной 3.5 $\mu_Б$ – для x = 1 [3].

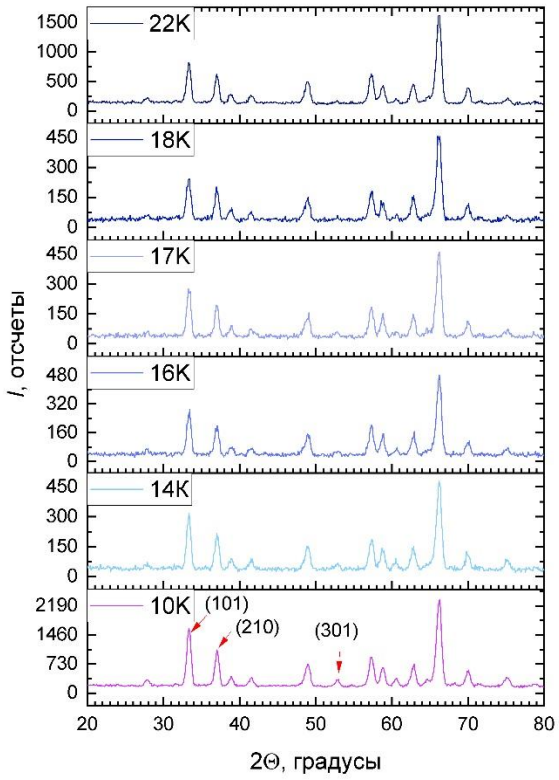


Рис. 1. Экспериментальные нейтронограммы $LiNi_{0.25}Co_{0.75}PO_4$ (λ = 2.43805 Å) при низких температурах. Стрелками отмечены рефлексы (101), (210) и (301), интенсивность которых уменьшается (за счет уменьшения магнитного вклада) при увеличении температуры

Уточненные параметры кристаллической структуры $LiNi_{0.25}Co_{0.75}PO_4$ при температуре 10 К составили a = 10.1352 ± 0.0009 Å; b = 5.8850 ± 0.0005 Å; c = 4.6805 ± 0.0001 Å и практически не изменяются в исследуемом интервале температур. Наилучшее описание нейтронограмм получено для модели магнитной структуры, в которой магнитные моменты ионов Ni/Co в позиции (1/4+ε; 1/4; 1−δ) и (3/4+ε; 1/4; 1/2+δ) упорядочены антипараллельно магнитным моментам в позиции (3/4−ε; 3/4; δ) и (1/4−ε; 3/4; 1/2−δ), где ε = 0.285(7); δ = 0.017(2). Величина магнитного момента ионов никеля/кобальта в $LiNi_{0.25}Co_{0.75}PO_4$ уменьшается от 3.5 $\mu_Б$ (при 10 К) до 0 (при 19 К) и может быть описана в рамках 2D модели Изинга с критическим индексом β = 0.2 и температурой Нееля T_N = 18.5 К. Уменьшение температуры Нееля связано с конкуренцией косвенных обменных взаимодействий $Ni/Co_{4c}–O_{8d}–Ni/Co_{4c}$ и переориентацией магнитного момента в плоскости bc.

Работа выполнена при финансовой поддержке государственного задания МИНОБРНАУКИ России (шифр «Поток» Г.р. № 122021000031-8).

1. Kartchickrabhu S., et al. Electrochemical performances of $LiNi_{1-x}Mn_xPO_4$ (x = 0.05–0.2) olivine cathode materials for high voltage rechargeable lithium ion batteries // Appl. Surf. Sci. 2018. V. 449. P. 435–444.
2. Urusova N.V., et al. Analysis of migration maps and features of magnetic properties of $LiNi_{0.25}Co_{0.75}PO_4$ (M = Co, Mn) single crystals // J. All. Comp. 2019. V. 781. P. 571–581.
3. Semkin, M. A., et al. Models of Ni- and Co-ion occupation in LiNi0.5Co0.5PO4 orthophosphate and its magnetic structure. // J. Phys. Condens. Matter 2022. V. 34(16). P. 165801.

ВЛИЯНИЕ КОБАЛЬТА НА ТЕРМИЧЕСКУЮ СТАБИЛЬНОСТЬ И СТЕКЛООБРАЗУЮЩУЮ СПОСОБНОСТЬ АМОРФНЫХ СПЛАВОВ Al-Ni-Co-РЗМ

Русанов Б.А.[1], Сидоров В.Е.[1]
[1)] Уральский государственный педагогический университет, Екатеринбург, Россия
E-mail: rusfive@mail.ru

THE INFLUENCE OF CO ON THERMAL STABILITY AND GLASS-FORMING ABILITY OF Al-Ni-Co-R AMORPHOUS ALLOYS

Rusanov B.A.[1], Sidorov V.E.[1]
[1)] Ural State Pedagogical University, Ekaterinburg, Russia

Amorphous ribbons of Al-Ni-Co-R compositions were produced by a standard planar flow casting method. Their kinetics of crystallization was studied by X-rays, DSC and DTA. Thermal stability and glass-forming ability of the alloys are determined.

Аморфные и нано-кристаллические сплавы на основе алюминия с переходными и редкоземельными металлами активно исследуются в последние годы, благодаря их коррозионной стойкости и механическим свойствам (прочности, пластичности, микротвердости). Поиск составов, обладающих высокой стеклообразующей способностью и термической стабильностью аморфного состояния является одной из актуальных задач.

В настоящей работе исследованы термическая стабильность и стеклообразующая способность аморфных сплавов $Al_86Ni_6Co_2РЗМ_6$ и $Al_86Ni_4Co_4РЗМ_6$ (РЗМ = Nd, Sm, Gd, Tb, Yb). Образцы сплавов получены в виде лент методом спиннингования в защитной атмосфере аргона. Ширина лент – 4 мм, толщина – 36-45 мкм.

Структура лент изучена методами дифракции рентгеновских лучей и просвечивающей электронной микроскопии, кинетика кристаллизации - методом дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК) и дифференциального термического анализа (ДТА) с различными скоростями нагрева.

Установлено, что увеличение содержания кобальта существенно влияет на тепловые процессы, происходящие на первой стадии кристаллизации. Замена 8 ат. % никеля на 6 ат. % никеля + 2 ат. % кобальта не меняет типа первой и второй тепловых реакций, однако приводит к значительному изменению характера тепловых реакций на последних стадиях кристаллизации. Дальнейшее повышение содержания кобальта до 4 ат. % существенно увеличивает термическую стабильность аморфного состояния (почти на 100 K).

Основываясь на характеристических температурах для сплавов Al-Ni-Co-РЗМ, определенных из ДСК и ДТА-кривых, рассчитаны наиболее известные

критерии стеклообразующей способности. Показано, что существующие критерии никак не отражают изменение стеклообразующей способности сплавов Al-Ni-Co-РЗМ при введении различных редкоземельных металлов и изменения соотношения переходных металлов, хотя экспериментально нами это обнаружено [1]. Ещё одним существенным недостатком существующих критериев GFA является отсутствие у них «предсказательной» функции. Только после синтеза сплава и получения его аморфного образца возможно определение характеристических температур и дальнейший расчёт критериев GFA. В качестве априорного критерия предложено использовать парамагнитную температуру Кюри.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда №22-23-00177.

1. Svec P., Rusanov B., Moroz A., Petrova S., Janickovic D., Sidorov V., Svec Sr. P. Crystallization behavior of two Al-Ni-Co-Gd amorphous alloys with selected Ni/Co ratios // Journal of Alloys and Compounds. - 2021, - V. 876. - 160109.

ИССЛЕДОВАНИЯ СТРУКТУРНЫХ ИЗМЕНЕНИЙ В ГИДРИРОВАННЫХ СВЕРХРЕШЕТКАХ Fe/Gd МЕТОДАМИ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКЦИИ И РЕФЛЕКТОМЕТРИИ

Рыжова А.А.[1], Девятериков Д.И.[1]
[1)] Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения РАН (ИФМ УрО РАН)
E-mail: a.a.ryzhova@imp.uran.ru

STUDIES OF STRUCTURAL CHANGES IN HYDROGENATED Fe/Gd SUPERLATTICES BY X-RAY DIFFRACTION AND REFLECTOMETRY

Ryzhova A.A.[1], Devyaterikov D.I.[1]
[1)] M.N. Mikheev Institute of Metal Physics of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences (IMP UB RAS)

The article is devoted to the study of the effect of hydrogenation on the structural properties of Fe/Gd superlattices. It was found that as a result of the penetration of hydrogen into the gadolinium layers, the period of the Fe/Gd superlattice increases and additional phases GdH2 and GdH3 appear

Гидрирование – один из перспективных способов управляемого изменения структурных, магнитных и электронных свойств как объёмных образцов, так и многослойных наноструктур. Особенный интерес представляет гидрирование магнитных сверхрешёток на основе редкоземельных металлов, легко поглощающих водород из окружающей атмосферы [1-2]. В данной работе было исследовано влияние гидрирования на структурные свойства перспективных с точки зрения спинтроники сверхрешеток Fe/Gd [3-4].

Исследуемые образцы представляли собой сверхрешётки вида Si/Nb(10 нм)[Fe(3.5 нм)/Gd(x нм)]$_2$0, где x=1,2,3,5,7,10 нм. В данной работе было показано, что функции каталитического слоя, способствующего проникновению водорода вглубь сверхрешётки и наносимого на поверхность, может выполнять слой Ni (10нм). Образцы помещались в атмосферу водорода при давлении 720 торр при различных температурах в диапазоне от 300 К до 400 К на 6 часов, изменение структурных свойств контролировалось ex-situ с помощью рентгеновской дифрактометрии и рефлектометрии. На Рис. 1 представлены дифрактограмма и рефлетограмма сверхрешетки Si/Nb(10нм)[Gd(2 нм)/Fe(3.5 нм)]$_2$0/Ni(10 нм), измеренные до и после насыщения водородом при комнатной температуре.

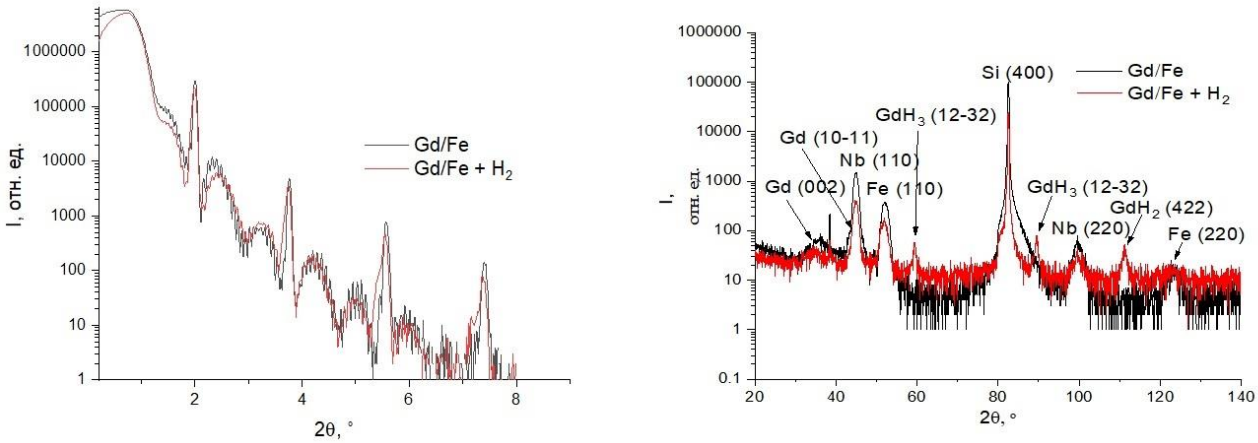


Рис. 1. Рефлектограммы и дифрактограммы от сверхрешетки, измеренные до и после гидрирования.

Анализ данных рентгеновской дифракции позволил установить, что после гидрирования помимо ГПУ фазы Gd появляются дополнительные фазы GdH_2 и GdH_3, в то время как постоянные решётки Fe и Nb в буферном слое не меняются. При этом изменение рефлектометрической кривой свидетельствует о росте среднеквадратичной величины шероховатости слоёв Gd с 0.5 до 1 нм и об увеличении средней толщины слоя Gd на 0.4 Å из-за проникновения атомов водорода в кристаллическую решётку образца.

Данные результаты позволили экспериментально доказать возможность гидрирования сверхрешеток Fe/Gd с каталитическим слоем Ni, и определить влияние диффузии водорода на химический состав и кристаллическую структуру гидрируемых слоёв Gd.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «Спин» № 122021000036-3)

1. P. Vajda Hygrogen in rare-earth metals, including RH2+x phases, Handbook of Physics and Chemistry of Rare Earths, vol. 20, pp. 207-291, 1995
2. Dynamics of H in a Thin Gd Film: Evidence of Spinodal Decomposition [Текст] / Y. Manassen, H. Realpe, D. Schweke // Journal of Physical Chemistry C, vol. 123, pp. 11933-11938, 2019
3. Twisted magnetization states and inhomogeneous resonance modes in a Fe/Gd ferrimagnetic multilayer [Текст] / A.B.Drovosekov, A.O.Savitsky, D.I.Kholin, N.M.Kreines, V.V.Proglyado, M.V.Makarova, E.A.Kravtsov, V.V.Ustinov // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. — 2019. — V. 475. — P. 668—674
4. Nature of inhomogeneous magnetic state in artificial Fe/Gd ferrimagnetic multilayers. [Текст] / D. Haskel, G. Srajer, Y. Choi, D. R. Lee, J. C. Lang, J. Meersschaut, J. S. Jiang, and S. D. Bader // Physical Review B — 2003. — V 67(18). — P. 180406(R)

ОБМЕННОЕ УСИЛЕНИЕ G-ФАКТОРА ЭЛЕКТРОНОВ В МЕТАМОРФНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ InGaAs/InAlAs С ВЫСОКИМ СОДЕРЖАНИЕМ InAs

Сандаков Н.С.[1], Гудина С.В.[1], Неверов В.Н.[1], Боголюбский А.С.[1], Туруткин К.В.[1], Якунин М.В.[1], Васильевский И.С.[2], Виниченко А.Н.[2]
[1)] Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения РАН, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», г. Москва, Россия
E-mail: sandakovns@imp.uran.ru

EXCHANGE ENHANCEMENT OF THE ELECTRON G-FACTOR IN InGaAs/InAlAs METAMORPHIC HETEROSTRUCTURES WITH A HIGH InAs CONTENT

Sandakov N.S[1], Gudina S.V.[1], Neverov V.N.[1], Bogoliubskiy A.S.[1], Turutkin K.V.[1], Yakunin M.V.[1], Vasil'evskiy I.S.[2], Vinichenko A.N.[2]
[1)] M.N. Mikheev Institute of Metal Physics Ural Branch of Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia
[2)] National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, Russia

Magnetotransport in InGaAs/InAlAs heterostructures in tilted magnetic field is studied. It is shown that the value of the g* factor increases with an increase in the InAs content and the dependence of the g* factor on magnetic field is also revealed

Полупроводниковые гетероструктуры на основе InGaAs являются весьма востребованными технологическими материалами, обладающими выдающимися свойствами носителей заряда, а именно, малой эффективной массой, что делает возможным их использование в СВЧ электронике, сравнительно малой шириной запрещенной зоны и большим значением эффективного g-фактора, что в свете поиска новых физических принципов построения приборов привлекает внимание исследователей.

Проведены гальваномагнитные исследования гетероструктур InGaAs/InAlAs с квантовыми ямами $In_xGa_{1-x}As$ (x= 90, 85) шириной 14 нм в магнитных полях до 13 Т при фиксированной температуре 1,8 К. Из анализа эволюции амплитуды, фазы и положения осцилляций Шубникова-де Гааза и квантового эффекта Холла при различных углах наклона магнитного поля по отношению к нормали к плоскости двумерного газа был определен эффективный g-фактор носителей заряда.

Метод совпадений [1], основа которого строится на предположении, что изменение угла наклона магнитного поля позволит изменять соотношение между

энергиями орбитального квантования и зеемановского расщепления, дает возможность определить значение эффективного g-фактора на уровне Ферми. Были определены значения эффективного g-фактора для двух исследуемых систем: для $In_{90}Ga_{10}As$ |g*|=14.8, 10, 9.4 и 9 и $In_{85}Ga_{15}As$ |g*|=10.3, 9.37, 3.89 и 1.57 для факторов заполнения v=3, 5, 7 и 9, соответственно. Также была оценена анизотропия g-фактора g∥/g⊥ и показано, что при всех углах наклона магнитного поля g∥/g⊥ не превышает единицы. Можно заметить уменьшение величины эффективного g-фактора с увеличением фактора заполнения, а также в зависимости от содержания InAs в квантовой яме.

Теоретические расчеты в рамках 8-ми зонного kp-метода в приближении Хартри-Фока [2] предсказывают осциллирующий характер зависимости эффективного g-фактора от магнитного поля: локальным максимумам будут соответствовать нечетные факторы заполнения, сами же значения g-фактора будут увеличиваться с уменьшением величины магнитного поля. В свою очередь учет эффекта экранировки делает данную зависимость немонотонной. В работе [3] были проведены теоретическое исследование анизотропии g-фактора и показано, что для широких квантовых ям величина анизотропии g-фактора не превышает единицы.

Таким образом, при исследовании систем на основе InGaAl/InAlAs мы получили большие значения эффективного g-фактора, много больше одноэлектронного, полученного из электронного спинового резонанса для подобных структур [4], что делает необходимым учет обменного взаимодействия и влияние эффекта экранировки. Также стоит отметить увеличение величины g-фактора при увеличении содержания InAs в квантовой яме.

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме «Электрон» Г.р. № 122021000039-4.

1. F.F. Fang, P.J. Stiles, Phys. Rev. 174, 823 (1968).
2. S. S. Krishtopenko, V. I. Gavrilenko, M. Goiran, J. Phys.: Condens. Matter 23, 385601 (2011).
3. Е.Л. Ивченко, А.А. Киселев. ФТП, 26, 1471 (1992).
4. M. Dobers, J. P. Vieren, Y. Guldner, P. Bove, F. Omnes, and M. Razeghi Phys. Rev. B 40, 8075(R)

ВЛИЯНИЕ ЗАТУХАНИЯ НА КАУСТИКУ МАГНИТОУПРУГИХ ВОЛН В ФЕРРОМАГНЕТИКАХ

Савченко С.П.[1, 2], Бахарев С.М.[1, 2], Борич М.А.[1, 2]
[1)] ИФМ УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2)] ЧелГУ, Челябинск, Россия
E-mail: sergeysavch@imp.uran.ru

THE EFFECT OF DISSIPATION ON THE CAUSTICS OF MAGNETOELASTIC WAVES IN FERROMAGNETS

Savchenko S.P.[1, 2], Bakharev S.M.[1, 2], Borich M.A.[1, 2]
[1)] IMP UB RAS, Yekaterinburg, Russia
[2)] CSU, Chelyabinsk, Russia

The report is devoted to the invetigation of damping influence to wave's caustics in elastically anisotropic magnetic materials. Based on phenomenological model, we defined the dependence of caustic patterns on damping parameter and elasic anisotropy.

Проведено исследование влияния величины упругой анизотропии на картины каустики магнитоупругих волн (МУВ) в кристаллах кубической симметрии. Спектр и поверхности постоянной частоты МУВ были рассчитаны для трех ферромагнитных образцов с различными упругими свойствами: (1) упругоизотропный ферромагнетик и ферромагнетики с (2) слабо ($Y_3Fe_5O_{12}$) и (3) сильно анизотропными упругими подсистемами (галфенол $Fe_{82}Ga_{18}$). Использовалось феноменологическое приближение [1,2], была учтена диссипация спиновых волн.

Показано, что магнитоупругое взаимодействие приводит к возникновению особенностей МУВ. При частотах вблизи магнитоупругого резонанса формируются направления, вдоль которых интенсивность МУВ резко возрастает. Совокупность этих направлений образует картины каустики [3]. Для изотропных и слабо анизотропных ферромагнетиков каустика обусловлена только магнитоупругим взаимодействием, и может наблюдаться лишь в узкой области частот и магнитных полей. Для сильно анизотропных ферромагнетиков каустика может реализовываться за счет упругой анизотропии системы, однако магнитоупругость приводит к появлению новых направлений с высокой интенсивностью, и картина каустики становится существенно более сложной.

Исследование эффектов диссипации выявило их существенное влияние на спектр МУВ и картины каустики. В частности, в упругоизотропных и слабо анизотропных ферромагнетиках каустики исчезают даже при малом затухании. Например, в объемном образце ЖИГ ($Y_3Fe_5O_{12}$) каустика становится невозможной, если параметр диссипации Гильберта больше 10^{-5}. В случае сильно упругоанизотропного ферромагнетика (галфенол $Fe_{82}Ga_{18}$) диссипация

по-разному влияет на каустику мод LmT1, T1mT2 и T2m. В частности, из-за затухания для моды T1mT2 исчезает большая часть линий из картины каустики, тогда как для мод LmT1 и T2m картина каустики упрощается, но значительная ее часть сохраняется (см. рис. 1). Это позволяет сделать вывод о том, что в упругоанизотропных ферромагнетиках их можно наблюдать даже при существенной диссипации.

Результаты исследования получены в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема «Функция» № 122021000035–6) и при поддержке гранта РНФ (проект № 22-19-00355).

1. M.A. Borich, S.M. Bakharev, S.P. Savchenko. Effect of magnon dissipation in the caustic pattern of magnetoelastic waves in ferromagnets. Chinese Journal of Physics. 2022. V. 80. P. 367—377.
2. Такер Дж., Рэмптон В. Гиперзвук в физике твердого тела. — М.: Мир, 1975. — 455 с.
3. Wolfle J.P. Imaging Phonons Acoustic Wave Propagation in Solids — N.Y. Cambridge University Press, 1998. — p.411.

НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЕ ПОСЛЕСВЕЧЕНИЕ НАНОКРИСТАЛЛОВ InP/ZnS

Савченко С.С.[1], Вохминцев А.С.[1], Вайнштейн И.А.[1]
[1)] НОЦ НАНОТЕХ, УрФУ, Екатеринбург, Россия
E-mail: s.s.savchenko@urfu.ru

LOW-TEMPERATURE AFTERGLOW OF InP/ZnS NANOCRYSTALS

Savchenko S.S.[1], Vokhmintsev A.S.[1], Weinstein I.A.[1]
[1)] NANOTECH Centre, Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia

Luminescent properties of water-soluble core/shell InP/ZnS quantum dots were studied. A long-lasting afterglow of the samples at 7 K is observed. Spectral distribution of emission and its decay kinetics reveal several types of recombination centers.

Для разработки устройств оптоэлектроники нового поколения, высокочувствительных биолюминесцентных меток и сенсоров требуются оптические материалы, характеризующиеся малым размером, спектрально-настраиваемым эффективным поглощением и свечением, а также высокой экологической совместимостью. Перечисленным требованиям отвечают коллоидные квантовые точки фосфида индия, покрытые оболочкой сульфида цинка [1,2]. Известно, что при температурах ниже 100 К в спектрах фотолюминесценции таких нанокристаллов проявляется интенсивная низкоэнергетическая полоса, связанная с дефектами [3]. Однако, природа центров, ответственных за указанную эмиссию, остается дискуссионной. В этой связи данная работа посвящена анализу процессов послесвечения фотолюминесценции (ФЛ) УФ-облученных квантовых точек InP/ZnS различного размера при криогенной температуре.

Исследовались водорастворимые коллоидные квантовые точки I типа InP/ZnS, стабилизированные покрытием на основе полиакриловой кислоты. Оценка среднего размера нанокристаллов выполнялась по положению максимума первой экситонной полосы поглощения. Полученные значения составили 2.1 (КТ-1) и 2.3 (КТ-2) нм. Послесвечение регистрировалось для пленок КТ на кварцевых подложках, помещенных в гелиевый криостат Janis CCS-100/204N. Температура регулировалась с помощью контроллера LakeShore Model 335 и поддерживалась в процессе измерений при 7 К. В качестве источника облучения выступала ультрафиолетовая лампа ЛД(Д), свет которой проходил через фильтр УФС-1 и фокусировался конденсором на образце. Детектирование люминесцентного сигнала после отключения лампы осуществлялось в течение 40 минут с использованием дифракционной решетки SR3-GRT-0150-0500 спектрографа Shamrock SR-303i-B и ПЗС-матрицы

Newton^{EM} DU970P-BV-602, охлажденной до температуры -80 °C и работающей в режиме электронного умножения.

Спектры послесвечения КТ InP/ZnS характеризуются максимумами интенсивности при 1.97 (КТ-1) и 1.83 (КТ-2) эВ, которые хорошо согласуются с положениями дефект-связанной полосы ФЛ, наблюдаемой при температурах ниже 100 K. Спектры с высокой точностью описываются двумя полосами гауссовой формы. Обнаружено, что снижение интенсивности люминесценции характеризуется двухкомпонентной экспоненциальной кинетикой с постоянными времени 44–46 и 291–320 с для различных образцов. Обсуждается природа локализованных энергетических уровней, ответственных за наблюдаемое свечение.

Работа выполнена при поддержке научного проекта Минобрнауки РФ FEUZ-2023-0014.

1. Savchenko S.S., Vokhmintsev A.S., Weinstein I.A., Opt Mater Express, 7, 354 (2017)
2. Savchenko S.S., Weinstein I.A., Nanomaterials, 9, 716 (2019)
3. Savchenko S.S., Vokhmintsev A.S., Weinstein I.A., J Lumin, 242, 118550 (2022)

ОЦЕНКА УПРУГИХ МЕХАНИЧЕСКИХ НАПРЯЖЕНИЙ В ФЕРРОМАГНЕТИКАХ С РАЗНЫМИ ЗНАКАМИ МАГНИТОСТРИКЦИИ

Щапова Е.А.[1], Сташков А.Н.[1]
[1)] Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения РАН
E-mail: schapova@imp.uran.ru

ESTIMATION OF ELASTIC MECHANICAL STRESSES IN FERROMAGNETS WITH DIFFERENT MAGNETOSTRICTION SIGNS

Schapova E.A.[1], Stashkov A.N.[1]
[1)] M.N. Miheev Institute of Metal Physics of Ural Branch of Russian Academy of Sciences

The theses presents the results of a study of the magnetoelastic effect on the example of commercially pure iron and nickel, which have different magnetostriction signs. It has been found that the field dependences of the reversible magnetic permeability under elastic compression of iron and elastic

Известно, что некоторые магнитные свойства обладают высокой чувствительностью к напряженно-деформированному состоянию ферромагнетиков [1]. Действующие напряжения могут формировать в ферромагнетике наведенную магнитную анизотропию типа «легкая плоскость» (знаки магнитострикции и напряжений противоположны $\lambda \cdot \sigma < 0$) либо «легкая ось» (знаки магнитострикции и напряжений совпадают $\lambda \cdot \sigma > 0$) [2]. Ранее на примере малоуглеродистой стали [3] было показано, что наведенная напряжениями магнитная анизотропия типа «легкая плоскость» оказывает влияние на процессы перемагничивания, увеличивая количество 90-градусных доменных границ и меняя критические поля их смещений. Определение критических полей смещения 90-градусных доменных границ лежит в основе предложенной методики оценки механических напряжений [4]. Целью данной работы является исследование особенностей перемагничивания упруго-деформированных ферромагнетиков с разными знаками магнитострикции и оценка механических напряжений по предложенной методике.

В качестве ферромагнетиков с разными знаками магнитострикции выбраны технически чистые железо (АРМКО-железо) ($\lambda > 0$) и никель ($\lambda < 0$). Длина образцов составляла 100 мм, сечение 2х3 мм2. Перед проведением испытаний с приложением внешних усилий образцы были отожжены в вакууме для снятия внутренних напряжений. Измерение полевых зависимостей обратимой магнитной проницаемости (U~(H)) происходило по схеме, подробно описанной в [4]. Напряженность магнитного поля измеряли датчиком Холла, плотно зафиксированным на поверхности образца (считаем, что напряженность магнитного поля на поверхности совпадает с внутренним полем образца).

Установлено, что по мере увеличения прикладываемой к АРМКО-железу сжимающей нагрузки кривые U~(H) уширяются, появляются перегибы справа (H>0) и слева (H<0) от основного (в поле коэрцитивной силы) максимума. При сжимающей нагрузке 60 кгс на кривой U~(H) отчетливо видны два перегиба слева и справа от основного максимума. После приложения к образцу никеля растягивающей нагрузки 10 кгс кривая U~(H) становится шире относительно исходного состояния, появляется видимый перегиб справа от основного максимума. При растягивающих нагрузках 20 и 30 кгс кривые U~(H) становятся еще шире, справа от основного максимума перегиб становится еще более четким, он наблюдается в еще больших полях. Слева от основного максимума визуально становится различим второй перегиб.

Полевые зависимости обратимой магнитной проницаемости были аппроксимированы тремя функциями псевдо-Фойгта для определения полей пиков, вызванных необратимыми смещениями 90-градусных доменных границ. Определив поля пиков, были рассчитаны механические напряжения в АРМКО-железе и никеле σрасч [4]. В расчетах использовали константу магнитострикции λ100 для железа, соответствующую направлению оси легкого намагничивания, и λ111 для никеля. Полученные результаты хорошо согласуются со значениями механических напряжений, рассчитанными по формуле σxx=-Fx/S, где Fx – нагрузка, определяемая динамометром.

Исследование выполнено в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (шифр «Диагностика» Г.р. № 122021000030-1).

1. Бозорт, Р. Ферромагнетизм / Р. Бозорт. – М.: Издательство иностранной литературы, 1956. – 770 с.
2. Вонсовский, С.В. Ферромагнетизм / С.В. Вонсовский, Я.С. Шур. – Л.: ОГИЗ, 1948. – 816 с.
3. A procedure and device for calibration-free determination of residual compression stresses in low-carbon steels deformed by tension / A.P. Nichipuruk, A.N. Stashkov, V.G. Kuleev [и др.] // Russian Journal of Non-destructive testing. – 11. – 2017 г.
4. Magnetic incremental permeability as indicator of compression stress in low-carbon steel / A.N. Stashkov, E.A. Schapova , A.P. Nichipuruk , A.V. Korolev // NDT and E International. – 118. – 2021. – p. 102398.

ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ МАГНИТНОГО ГИСТЕРЕЗИСА СЛОЁВ FE В ПЛЁНОЧНЫХ СТРУКТУРАХ НА ОСНОВЕ АНТИФЕРРОМАГНЕТИКА $Cr_{80}Mn_{20}$

Северова С.В.[1], Фещенко А.А.[1], Горьковенко А.Н.[1], Васьковский В.О.[1, 2]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: severova.sveta.severova@yandex.ru

TEMPERATURE CHARACTERISTIC OF MAGNETIC HYSTERESIS OF FE LAYERS IN FILM STRUCTURES BASED ON ANTIFERROMAGNET $Cr_{80}Mn_{20}$

Severova S.V.[1], Feshchenko A.A.[1], Gorkovenko A.N.[1], Vas'kovskiy V.O.[1, 2]
[1)] Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia
[2)] Institute of Metal Physics, Ural Branch of Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russia

The article discusses the magnetic properties of Ta/Cr 80 Mn 20/Fe/Ta and Ta/Fe/Cr 80 Mn 20/Fe/Ta films. The temperature dependences of a number of parameters of the hysteresis loops of the ferromagnetic layer in the studied films are obtained.

Бинарный сплав Cr-Mn в определённой области составов относится к числу высокотемпературных антиферромагнетиков [1] и в этой связи представляет интерес как источник магнитного закрепления в слоистых плёночных структурах типа спиновый клапан [2]. Однако на сегодняшний день он слабо исследован в этом качестве. Данная работа ориентирована на восполнение указанного пробела и посвящена изучению закономерностей температурного изменения гистерезисных свойств ферромагнитного слоя, в составе слоистой пары типа CrMn/Fe.

Образцы для исследования представляли собой многослойные плёнки Ta(5)/$Cr_{80}Mn_{20}$(L)/Fe(10)/Ta(5) и Ta(5)/Fe(5)/$Cr_{80}Mn_{20}$(L)/Fe(10)/Ta(5), и были получены методом магнетронного распыления на покровных стёклах Corning. В скобках указаны толщины слоёв в нм. L – толщина бинарного слоя, принимавшая значения 20 и 100 нм, а конкретный состав был выбран на основе предварительных экспериментов. Аттестация структурного состояния плёнок проведена на рентгеновском дифрактометре Pananalitical. Для измерений магнитных свойств использовались, измерительный комплекс PPMS DynaCool, СКВИД-магнитометр MPMS XL7 и Керр-магнитометр EvicoMagnetics.

В результате проведённых экспериментов определены температурные зависимости ряда параметров петель гистерезиса слоёв Fe в плёнках, отличающихся толщиной слоя CrMn и структурой буферного покрытия:

коэрцитивной силы продольных (измеренных вдоль оси технологического поля) петель гистерезиса H_c, анизотропии коэрцитивной силы в плоскости плёнок, поля обменного смещения H_{ex}. Некоторые их них приведены на рисунке 1. Выполнен причинно-следственных анализ установленных закономерностей.

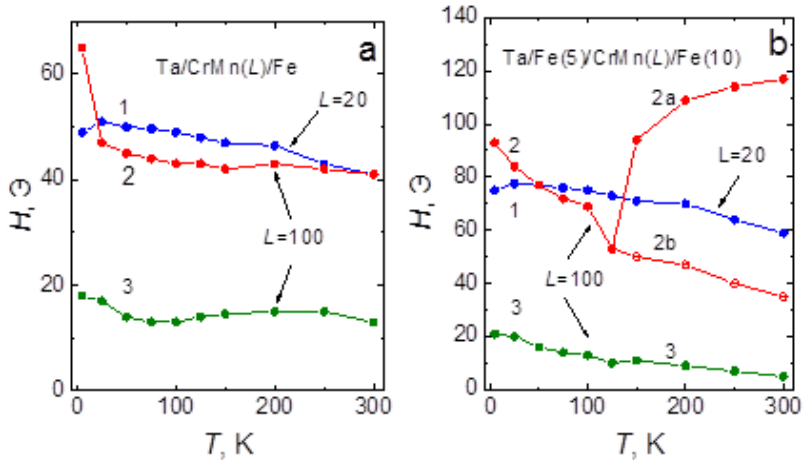


Рис. 1. Температурные зависимости продольной коэрцитивной силы (кривые 1,2) и поля обменного смещения (кривые 3) в плёнках, содержащих различные буферные покрытия (графики a,b) и слои Cr80Mn20 разной толщины L. Части кривой 2 на графике b относятся к основному (2a) и буферному (2b) слоям

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, грант №22-22-00814

1. Feng W. et al. Structural and magnetic phase diagrams of epitaxial Cr–Mn alloy thin films //Journal of Applied Physics. – 2010. – Т. 108. – №. 7. – С. 073915.
2. O'Grady K. et al. Anisotropy in antiferromagnets // Journal of Applied Physics. – 2020. – Т. 128. – №. 4. – С. 040901 .

ПРИМЕНЕНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОГО РАЗРЕШЕНИЯ ФУНКЦИЙ ГРИНА ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ КОЛЛЕКТИВНЫХ СПИНОВЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ В ПРОВОДЯЩИХ МАТЕРИАЛАХ

Шагивалеева С.Р.[1], Кашин И.В.[1]
[1)] Уральский Федеральный университет, Екатеринбург, Россия
E-mail: SvetlanaShagivaleeva@gmail.com

APPLICATION OF SPATIAL RESOLUTION OF GREEN'S FUNCTIONS FOR MODELING COLLECTIVE SPIN EXCITATIONS IN CONDUCTING MATERIALS

Shagivaleeva S.R.[1], Kashin I.V.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The spatial description of the spin spirals of conducting compounds is problematic. In this paper we solve the problem of calculating the spin stiffness constant. The research is carried out on model and real crystals.

Теоретическая оценка пространственных характеристик спиновых спиралей простых кристаллов и изоляторных материалов не представляет затруднений. Однако описание характеристик проводящих веществ остается открытой научной проблемой. Поведение магнитных материалов можно смоделировать на микроуровне. Сложность заключается в отсутствии численной сходимости микроскопических спиновых моделей.

Для решения данной проблемы ссылаемся на описанный в статье [1] подход. В работе подробно останавливаются на вопросе самосогласованности и сходимости при использовании теоремы о локальных силах. Сформулированный метод основан на представлении изотропных обменных взаимодействий между магнитными атомами в обратном пространстве.

Использовав возможность устойчивого извлечения интенсивности суммарного обменного окружения, был разработан оригинальный подход для расчета константы спиновой жесткости. Данный метод хорошо зарекомендовал себя на проводящих веществах. Результаты представлены для модельных и реальных материалов.

1. Kashin I.V., Gerasimov A. and Mazurenko V.V., Phys. Rev. B 106, 134434 (2022)

ВЛИЯНИЕ НАПРАВЛЕНИЯ ДВИЖЕНИЯ ЛАЗЕРА НА МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ОБРАЗЦОВ, ПОЛУЧЕННЫХ SLS МЕТОДОМ

Шаймарданова Л.Г.[1], Русинова Т.Д.[1], Волегов А.С.[1], Мальцева В.Е.[1], Степанова Е.А.[1]

[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина

E-mail: ludmilashaim78@gmail.com

EFFECT OF LASER MOTION DIRECTION ON THE MAGNETIC PROPERTIES OF SAMPLES PRODUCED BY SLS METHOD

Shaimardanova L.G.[1], Rusinova T.D.[1], Volegov A.S.[1], Malceva V.E.[1], Stepanova E.A.[1]

[1)] Ural Federal University named after the First President of Russia B. N. Yeltsin

The study of the magnetic properties of iron powder samples after SLS production was carried out. It was shown that the direction of laser motion affects the magnetic parameters of the samples.

3D-печать является аддитивным методом изготовления трехмерных объектов практически любой формы. Данным методом так же возможно производство магнитных материалов [1, 2]. Однако в настоящее время технологии 3D-печати все еще имеют ряд ограничений, тормозящих ее широкое распространение. Частично решить эту проблему можно, исследуя зависимость свойств полученных образцов от технологии печати. В данной работе представлены результаты исследования влияния направления движения лазера на магнитные свойства изготовляемых образцов.

Печать осуществлялась методом аддитивной системы селективного лазерного спекания Orlas Creator RA, при котором частицы порошка спекаются вместе мощным лазером. Скорость прохождения лазерного луча по поверхности порошка составляла 1000 мм/с. Из порошка карбонильного железа были получены тороидальные образцы со наружным диаметром $d_н$=10 мм , внутренним диаметром $d_вн$=7 мм и высотой 4 мм. Исследовались образцы, полученные при мощности лазера 123,2 Вт (первая и вторая партии) и 140 Вт (третья и четверная партии). При направлении движения лазера «туда и обратно» были получены первая и третья партии, образцы второй и четвертой партии изготовлены при движении лазера в одну сторону. Измерение петель гистерезиса и основных кривых намагничивания, которые определяют главные магнитные параметры вещества, производилось на измерительно-вычислительном комплексе ММКС-100-05 с погрешностью не превышающей 3 %.

На Рисунке 1 представлены кривые намагничивания и петли гистерезиса, отражающие зависимость магнитной индукции B от величины магнитного поля H для различных партий образцов.

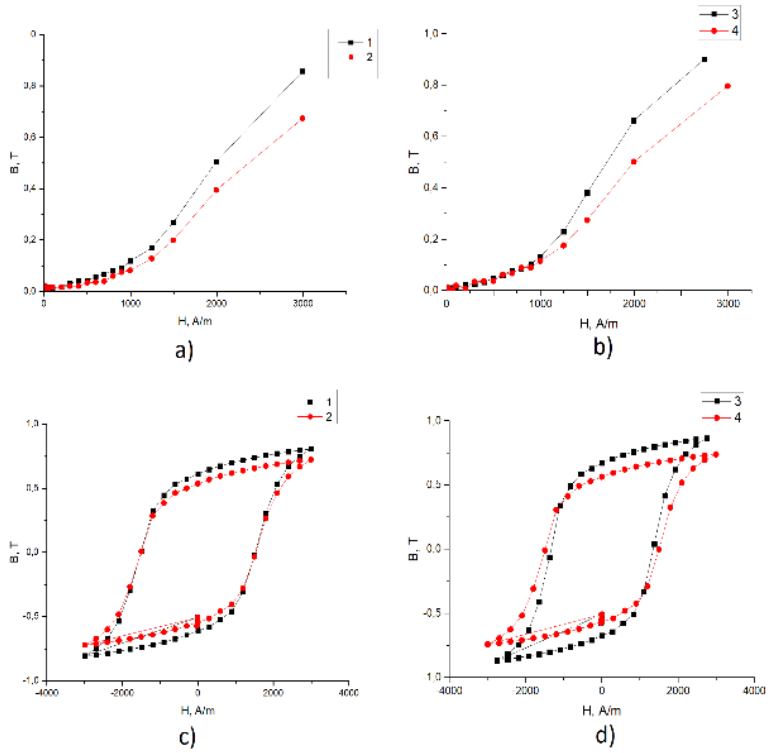


Рис. 1. Рисунок 1. a) Основные кривые намагничивания для партий 1, 2; b) Основные кривые намагничивания для партий 3, 4; c) Петли гистерезиса для партий 1, 2; d) Петли гистерезиса для партий 3, 4.

Из графиков a) и b) видно, что при фиксированной мощности образцы, полученные при движении лазера в направлении «туда и обратно», достигают состояния насыщения быстрее, так как их магнитная индукция B возрастает стремительнее.

Из графиков c) и d) видно, что при направлении движения лазера «туда и обратно», достигаются большие значения магнитной индукции B, так как петли гистерезиса соответствующих образцов имеют более вытянутую форму.

Таким образом показано, что направление движения лазера при получении образцов влияет на их магнитные свойства. При движении лазера в направлении «туда и обратно» частицы порошка более качественно спекаются, а следовательно, и сами образцы имеют лучшие магнитные характеристики.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке гранта РНФ № 21-72-10104

1. Zhukov A.S., Barakhtin B.K., Bobyr V.V., Kuznetsov P.A. and Shakirov I.V. The experience of magnets manufacturing from metal powder using a laser // JOURNAL OF PHYSICS: CONFERENCE SERIES. V. 14. (2021) P. 012122
2. А. Р. Сафин, Ranjan Kumar Behera, Аддитивное производство и оптимизация топологии магнитных материалов для электрических машин // Известия высших учебных заведений. Проблемы энергетики. (2021). V. 23. P. 14–33

МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА БЫСТРОЗАКАЛЕННЫХ СПЛАВОВ Sm-Fe-V

Шалагинов А.Н.[1], Голубятникова А.А.[1], Андреев С.В.[1], Волегов А.С.[1]
[1)] Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия
E-mail: demon3355@inbox.ru

MAGNETIC PROPERTIES OF RAPIDLY QUENCHED Sm-Fe-V ALLOYS

Shalaginov A.N.[1], Golubiatnikova A.A.[1], Andreev S.V.[1], Volegov A.S.[1]
[1)] Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia

This work about magnetic hysteresis properties of a Sm-Fe-V amorphus ribbons obtained by spin coating was investigated. It was found that at the optimum annealing temperature (850 °C), the coercive force value was 6,9 kOe, which makes it possible to obtain a sintered permanent magnet in the future.

С каждым годом в мире сильно растет спрос на минимизацию использования ископаемого топлива, с целью уменьшения углеродного следа в атмосфере. С этой целью используется альтернативный способ получения энергии, а именно использование ветровой энергии. Выбросы углерода в атмосферу наземным транспортом уменьшаются благодаря частичной замене бензиновых и дизельных на электрических или гибридных транспортные средства. Сформировавшаяся тенденция приводит к росту объема использования высокоэффективных постоянных магнитов, которые производятся с использованием редкоземельных металлов.

В связи с высокой стоимостью РЗМ, экономически выгодно производство таких постоянных магнитов, в которых содержание РЗ металлов было бы минимизировано. Одним из таких соединений является Sm-Fe-V с кристаллической структурой типа $ThMn_{12}$. Эти соединения содержат только 7,7 % РЗЭ, по сравнению с 11,8 % в $Nd_2Fe_{14}B$ [1]. Наряду с этим, Sm значительно дешевле Nd и спеченные сплавы с использованием Sm имеют более широкий диапазон рабочих температур, в сравнение со спеченными сплавами системы Nd-Fe-B.

Данный доклад посвящен исследованию магнитных свойств соединения $Sm_{10,5}Fe_{74,1}V_{15,4}$.

Для получения высокоэффективного спеченного постоянного магнита на основе сплава $Sm_{10,5}Fe_{74,1}V_{15,4}$ [2], проведено подводящее исследование полученных путем спиннингования аморфных лент.

Полученные аморфные ленты из гомогенизированного сплава $Sm_{10,5}Fe_{74,1}V_{15,4}$ подвергались термообработке при различных температурах в вакууме, а так же в аргоновой среде в течение 30 минут. Это позволило выявить температуру отжига,

при которой формируется оптимальная кристаллическая структура для получения максимально возможной коэрцитивной силы для полученных лент.

Наибольшее полученное значение H_c составило 6,9 кЭ. В докладе будут представлены кривые размагничивания лент Sm-Fe-V, подвергнутых термообработке при различных условиях, их анализ.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 21-72-10104).

1. A.M. Schonhobel, R. Madugundo, A.M. Gabay, J.M. Barandiaran, G.C. Hadjipanayis The Sm-Fe-V based 1:12 bulk magnets // Journal of Alloys and Compounds. - 2019. - №791. - P. 1122-1127.
2. Kazuki Otsuka, Masayuki Kamata, Tadao Nomura Coercivities of SmFeM Sintered Magnets with ThMn12-Type Structure (M = Ti, V) // Materials Transactions. - 2021. - №6, Vol.62. - C. 887-891.

ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ДИАГРАММ СИСТЕМЫ $AgBr_{0.7}I_{0.3}$-AgCl

Шатунова Д.В.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина
E-mail: d.v.shatunova@urfu.ru

STUDY OF $AgBr_{0.7}I_{0.3}$-AgCl SYSTEM PHASE DIAGRAM

Shatunova D.V.[1]
[1)] Ural Federal University

The work is devoted to the development of single crystals and optical ceramics. The materials are transparent in the visible and infrared spectral ranges, as well as in the terahertz frequency range. Optical materials are suitable for the production of lenses, windows and infrared fibers.

Актуальным и динамически развивающимся направлением современной оптики является разработка новых нетоксичных, фото- и радиационностойких, пластичных и высокопрозрачных материалов, работающих в диапазоне от 0,4 до 50,0 мкм и от 290 до 3000 мкм (1,03–0,1 ТГц) [1]. Одним из материалов, обеспечивающих широкий диапазон пропускания и высокие функциональные свойства являются твердые растворы системы $AgBr_{0.7}I_{0.3}$ – AgCl. Наличие в составе ионов серебра позволяет увеличить спектральное пропускание до дальнего инфракрасного диапазона, увеличить пропускание в терагерцовом диапазоне.

Для построения и изучения фазовой диаграммы состава $AgBr_{0.7}I_{0.3}$ – AgCl были использованы дифференциально-термический анализ (ДТА) и рентгенофазовый анализ (XRD) [2]. Исследование проводилось от 0 до 100 мас. % AgCl в $AgBr_{0.7}I_{0.3}$ с шагом в 5–15 мас. %, при температуре от 25 до 500 °C при давлении 1 атм.

Фазовая диаграмма системы $AgBr_{0.7}I_{0.3}$ – AgCl, полученная по результатам ДТА и РФА анализов, характеризуется неограниченной растворимостью в жидком состоянии (расплав системы, область I), и ограниченной растворимостью в твердом состоянии. Максимальная температура кристаллизации соответствует температуре 455 °C (728 K) – температура кристаллизации чистого хлорида серебра. Области II присутствует жидкая фаза, а также кристаллы твердого раствора. В областях IV и V существуют твердые растворы $AgBr_{0.7}I_{0.3}$ – AgCl с гранецентрированной кубической решеткой пространственной группы Fm3m (при содержании от 0 до 18 мол. % и от 74 до 100 мол. % AgCl в $AgBr_{0.7}I_{0.3}$). В областях III и VI возможно выделение фаз на основе AgI в различных модификациях.

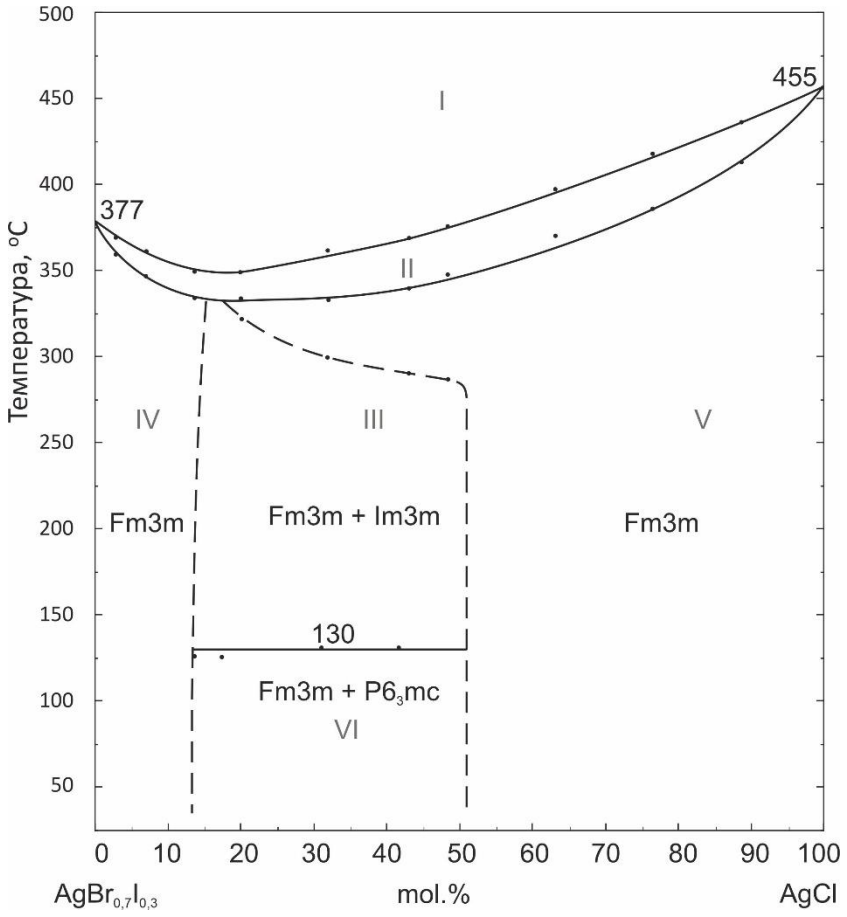


Рис. 1 - Фазовая диаграмма системы $AgBr_{0.7}I_{0.3}$ – AgCl

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Программы развития Уральского федерального университета имени первого Президента России Б.Н. Ельцина в соответствии с программой стратегического академического лидерства "Приоритет-2030".

1. The optical transparency investigation of crystals based on the AgHal – TlHal solid solutions systems in the terahertz range / L. V. Zhukova [et. al] // Optical Materials. — 2021. — № 113. — 110870
2. Synthesis of the AgBr – AgI system optical crystals / D. D. Salimgareev [et. al] // Optical Materials. — 2021. — № 114. — 110903.

ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ СИНТЕЗА НА МИКРОКРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ИСКУССТВЕННЫХ ГИДРОКСИАПАТИТОВ (ГАП)

Щанов В.А.[1], Чукин А.В.[1]
[1)] Уральский Федеральный университет имени первого президента России Б.Н. Ельцина, Физико-технологический институт, город Екатеринбург, Россия
E-mail: vsshchanov@mail.ru

THE INFLUENCE OF SYNTHESIS PARAMETERS ON MICROCRYSTAL STRUCTURE ARTIFICIAL HYDROXYAPATITES (HAP)

Shchanov V.A.[1], Chukin A.V.[1]
[1)] Ural Federal University named after the First President of Russia B.N. Yeltsin, Institute of Physics and Technology, Yekaterinburg, Russia

The phase composition and crystal structure of hydroxyapatites (HAP) obtained by chemical precipitation have been studied by X-ray phase analysis. During the experiment, samples annealed at 700 °C have a structure close to human tooth enamel and are promising for use as ionizing radiation sensors.

Практически полная идентичность структуры искусственных гидроксиапатитов $Ca_{10}(PO_4)_6(OH)_2$ с минеральной составляющей костной ткани человека обусловливает существенный интерес исследователей к этим соединениям [1]. Прежде всего это связано с поиском биосовместимых материалов для использования в медицинских целях [2]. Также известно применение эмали зубов в дозиметрических исследованиях различных радиационных ситуаций [3]. Данное использование обусловлено образованием парамагнитных центров при ионизации и захвате электронов карбонатными анионами, возникающими из-за дефектов кристаллической решетки гидроксиапатита. Из-за дефектов и обусловленных ими искажениями кристаллической решетки, становится энергетически выгодным образование ГАП в гексагональной сингонии P63/m. Именно такой решеткой обладает зубная эмаль, однако, в химически чистых условиях возможно получение искусственных ГАП с моноклинной сингонией (P21/n). Таким образом, микроструктура данного материала существенным образом оказывает влияние на его характеристики и физико-химические и химико-биологические свойства.

В данной работе мы изучаем влияние условий синтеза (главным образом температуры) на формирование микрокристаллической структуры гидроксиапатитов, синтезированных методом химического осаждения. При синтезе температура варьировалась от комнатной до 40°C. Кроме того образцы, полученные при комнатной температуре, подвергались последующему отжигу при температурах 500°C и 700°C.

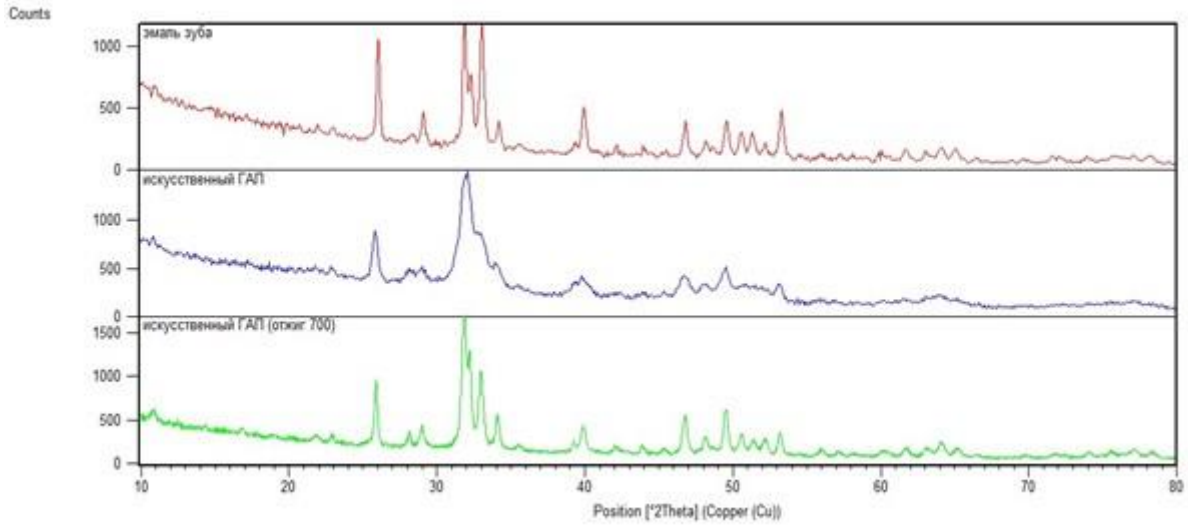


Рис. 1. Фрагменты дифрактограмм эмали зуба и искусственных ГАП.

Для изучения фазового состава образцов и их кристаллической структуры применялся метод рентгеновской дифракции. Дифрактограммы образцов были сняты на дифрактометре XPert PRO MPD (Panalytical) в Cu K-α излучении.

Проведенные исследования показали, что нагрев непосредственно во время химического осаждения не влияет на структуру ГАП, так же, как и последующий отжиг при 500°C. Однако образцы, отожжённые при 700°C, показывают структуру, близкую к эмали зуба человека (Рис. 1) и являются перспективными для использования в качестве материала для датчиков ионизирующего излучения.

1. Elliott C. Structure and Chemistry of Apatite and Other Calcium Orthophosphates. – Amsterdam etc.: Elsevier,1994.
2. Эффект наноразмерных частиц гидроксилапатита на кроветворные прекурсоры костного мозга / А. В. Карлов, И. А. Хлусов, М. В. Чайкина, Т.В. Дружинина. — 2007.
3. Вариабельность радиационной чувствительности эмали зубов жителей Уральского Региона / Шишкина Е. А.1, Толстых Е. И.1, Дегтева М. О.1, Иванов Д. В.1, Аладова Е.Е.1 // Бюллетень экспериментальной биологии и медицины. — 2012.

ВОЗМОЖНОСТЬ ОПРЕДЕЛНИЯ ОБЩЕГО СОДЕРЖАНИЯ ХИМИЧЕСКОГО ЭЛЕМЕНТА В ПРОБЕ ПО ДАННЫМ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФФРАКЦИИ

Щепин К. В.[1], Чукин А. В.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Физико-технологический институт, 620002, Екатеринбург, Россия
E-mail: kirya_schepin@mail.ru

THE POSSIBILITY OF DETERMINING THE TOTAL CONTENT OF A CHEMICAL ELEMENT IN A SAMPLE FROM X-RAY DIFFRACTION DATA

Shchepin K.V.[1], Chukin A. V.[1]
[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia B.N.Yeltsin, Institute of Physics and Technology, 620002, Ekaterinburg, Russia

A method for determining the Zr mass fraction in chloraluminates based on the analysis of X-ray diffraction pattern is proposed and tested. The dependence of the background intensity on the mass percentage of Zr was used to plotting the calibration curve.

Традиционно методы рентгеновской дифракции (XRD) применяются для определения фазового состава образца. При этом основными источниками информации служат расположение и интенсивность рефлексов на XRD-дифрактограмме, являющейся результатом интерференции когерентного рассеяния излучения на плоскостях кристаллитов. Для анализа этой информации разработаны и успешно применяются аналитические выражения, связывающие интенсивность рефлекса с характеристикой присутствующей фазы [1]. Таким образом, когерентное рассеяние хорошо изучено и освещено в литературе, в то время как некогерентному рассеянию, которое определяет фон дифрактограммы и тоже зависит от химического состава пробы, не уделено должного внимания. Чаще всего фон рассматривается, как фактор, мешающий анализу дифракторгаммы.

Хорошо известно, что величина фона зависит от суммарного массового коэффициента поглощения пробы, который в свою очередь определяется коэффициентами поглощения отдельных фаз, и их весовым содержанием [1]. Коэффициент поглощения фазы зависит от ее химического состав и рассеивающей способности атомов, ее составляющих. Таким образом, интенсивность фона дифрактограммы должна зависеть от количественного содержания атомов определенного сорта. Данная зависимость легла в основу метода определения количественного содержания циркония в замороженных расплавах хлораллюминатов ($KAlCl_4$).

На XRD-дифрактограммах проб с разным содержанием циркония была обнаружена зависимость интенсивности фона от весового процента циркония,

измеренного независимыми методами: «мокрая химия» и Рентгенофлуоресцентный анализ (рис. 1а). Было проведено измерение средней величины фона в определенном интервале углов дифракции для восемнадцати проб. Это позволило построить калибровочную кривую график зависимости интенсивности фона от содержания циркония (рис. 1б), которая может быть использована для измерения весового процента циркония в последующих пробах непосредственно по XRD-дифрактограмме, не прибегая к другим видам анализа.

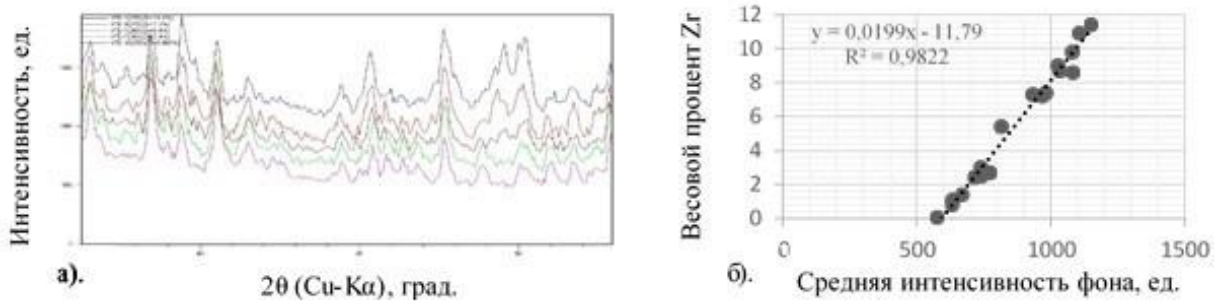


Рис. 1. а) Дифрактограмма проб хлоралюминатов с разным содержанием циркония, б) Калибровочная кривая

1. Взаимодействие рентгеновского излучения с веществом. Рентгеноструктурный и рентгеноспектральный анализ: учебно-методическое пособие / Р.Г. Батулин, А.Г. Киямов, О.В. Недопекин [и др.] – Казань: К(П)ФУ, 2021. – 185 с.

СПЕКТРАЛЬНО-РАЗРЕШЕННАЯ ТЕРМОЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ НАНОТРУБОК ДИОКСИДА ГАФНИЯ В ДИАПАЗОНЕ LNT – 623 K

Шилов А.О.[1], Медведев Т.Е.[1], Морозов А.Р.[1], Камалов Р.В.[1], Вохминцев А.С.[1], Вайнштейн И.А.[1, 2]
[1)] НОЦ НАНОТЕХ, Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Институт металлургии УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: ao.shilov@urfu.ru

SPECTRALLY RESOLVED THERMOLUMINESCENCE OF HAFNIA NANOTUBES IN LNT – 623 K RANGE

Shilov A.O.[1], Medvedev T.E.[1], Morozov A.R.[1], Kamalov R.V.[1], Vokhmintsev A.S.[1], Weinstein I.A.[1, 2]
[1)] NANOTECH Centre, Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia
[2)] Institute of Metallurgy of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russia

We investigate spectrally resolved thermoluminescence (TSL) of nanotubular monoclinic hafnia excited by UV-irradiation. The observed TSL emission in the blue-green (2.42 eV) region is caused by oxygen vacancies in various charge states.

Нанотубулярный диоксид гафния является перспективным материалом для применений в наноэлектронике, солнечной энергетике, при создании мемристорных устройств и ячеек сегнетоэлектрической памяти. Прикладные перспективы HfO_2 в перечисленных наукоемких областях во многом обусловлены свойствами, связанными, в частности, с собственными точечными дефектами на основе вакансий в кислородной подрешетке, которые могут выступать в роли и электронных, и дырочных ловушек. Ранее, нами были изучены оптические свойства тонких плёнок [1] и наноструктурированного порошка диоксида гафния [2, 3]. Для изучения влияния особенностей морфологии на люминесцентные свойства в настоящей работе исследованы процессы спектрально-разрешенной термостимулированной люминесценции (ТСЛ) нанотубулярных массивов анион-дефицитного диоксида гафния после воздействия УФ-излучением в диапазоне от температуры жидкого азота (LNT) до 623 K.

Нанотрубки HfO_2 были получены методом электрохимического анодирования гафниевой фольги в потенциостатическом режиме. После синтеза образцы отжигались в течение двух часов при температуре 700°C. В результате отжига образцы с аморфной «as-grown» структурой переходят в упорядоченную кристаллическую фазу с моноклинной симметрией.

Регистрация спектров ТСЛ проводилось с использованием разработанного измерительного канала на основе охлаждающей системы Linkam LNP96-S,

сопряжённой со спектрометром Andor Shamrock SR-303i-B и ПЗС-матрицей NewtonEM DU970P-BV-602. Перед измерениями проводился нагрев образцов до 623 K с целью опустошения возможных активных ловушек. В ходе эксперимента образец охлаждался до 78 K, облучался УФ-излучением с длиной волны 275 нм в течение 10 минут и затем нагревался до 623 K со скоростью 0.5 K/c. Одновременно с нагревом осуществлялась регистрация спектров свечения в диапазоне 300-850 нм с частотой 1 Гц. В результате нами были получены зависимости интенсивности ТСЛ-отклика облученных нанотрубок HfO_2 от длины волны свечения и температуры образца.

Наблюдаемые спектры ТСЛ свечения представляет собой полосу гауссовой формы с положением максимума 2.42 эВ и 0.65 эВ. Полученные спектральные параметры хорошо согласуются со спектральными характеристиками фотолюминесценции нанотрубок HfO_2 при возбуждении фотонами 275 нм.

Измеренные температурные ТСЛ-кривые характеризуются широким пиком с максимумом 280 K и полушириной 120 K. На основе анализа экспериментальных зависимостей в рамках формализма кинетики общего порядка установлено, что данный пик является суперпозицией трёх ТСЛ компонент, которые обусловлены термостимулированными процессами с участием ловушек с энергиями активации 60 ± 10, 200 ± 40 и 500 ± 40 мэВ. Полученные результаты обсуждаются с учётом возможной природы центров захвата и рекомбинации носителей заряда.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект № 23-22-00310

1. A. O. Shilov, S. S. Savchenko, A. S. Vokhmintsev, V. A. Gritsenko, I. A. Weinstein. AIP Conf. Proc., 2313, 030006 (2020).
2. .A.O. Shilov, A.S. Vokhmintsev, A.M.A. Henaish, I.A.Weinstein, Bull. Russ. Acad. Sci.: Phys., 84(7), 771-774 (2022).
3. A.O. Shilov, S.S. Savchenko, A.S. Vokhmintsev, V.A. Gritsenko, I.A. Weinstein., J. Lumin., 247, 118908 (2022).

МИГРАЦИЯ ОДИНОЧНОГО ПРОТОНА ПО ПОВЕРХНОСТИ ДВУМЕРНОГО СЛОЯ BCN

Шкодин А.В.[1], Борознина Е.В[1]
[1)] Волгоградский Государственный Университет. Волгоград, Россия.
E-mail: Poluosmak1998@gmail.com

PROTON MIGRATION ON A TWO-DIMENSIONAL BCN LAYER SURFACE

Shkodin A.V.[1], Boroznina E.V.[1]
[1)] Volgograd State University. Volgograd, Russian Federation.

Hydrogen atom adsorption on the surface of a two-dimensional BCN layer has studied. The research was carried out using the density functional theory. Two mechanisms of proton migration along the surface of two-dimensional BCN layer have been investigated namely “hopping” and “relay”.

Последние годы большого успеха достигли исследования, связанные с графеном – двумерная аллотропная модификация углерода. В связи с этим, по всему миру ученые начали исследования новых двумерных структур и соединений веществ, которые обладали бы еще более лучшими свойствами относительно графена в разных областях их потенциального применения. Одной из таких структур является двумерный слой гексагонального карбо нитрида бора h-BCN [1]. Ключевой особенностью данного слоя является то, что фактически он состоит из смеси углеродных связей C-C и боро-нитридных B-N, что в свою очередь позволяет изменять проводящие свойства материала, путем изменения концентрации связей B-N, в связи с этим проводятся широкие исследования относительно свойств данной структуры, а также ее синтеза. Таким образом данный материал является одним из наиболее привлекательных для изучения в настоящий момент. Например, ожидается что данное соединение будет перспективно в областях нано-электроники.

Исследования миграции протона проводились на кластере (рис.1).

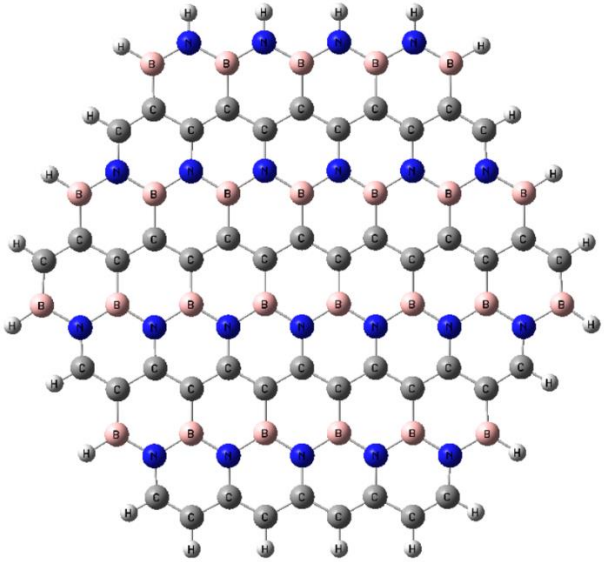


Рис. 1. Двумерный слой h-BCN.

Границы кластера замыкаются псевдо-атомами водорода, длины связей между атомами в пределах структуры варьируются от 1.39 Å между C-C, до 1.55 Å между B-C, в зависимости от соединенных веществ и положения связи в структуре. Моделирование механизма адсорбции происходило пошаговым приближением атома проводника H^+, размещенного в середине кластера, для минимизации влияния краевых эффектов, к атомам C, B, N вдоль перпендикуляра к поверхности двумерного слоя h-BCN. Как оказалось водород адсорбировался на поверхности C на расстоянии 1.2 Å, а на поверхности B и N на расстоянии 1.4 Å, с перераспределением электронной плотности в результате которого образовывался протон. При моделировании процесса миграции адсорбированного протона использовалось два механизма перемещения: «прыжковый» (перемещение внутри гексагона напрямую) и «эстафетный» (перемещение атома вдоль линии связи). Сами расчеты производились посредством создания фиктивного атома, находящегося над конечной точкой стационарного состояния протона. Далее происходило пошаговое приближение протона к фиктивному атому с изменением координаты реакции на величину 0.2 Å. По результатам расчетов были построены кривые потенциальной энергии, претерпеваемой протоном при миграции вдоль слоя, а также проведен анализ зонного строения слоя, с построением графиков плотности состояний при различной локализации протона.

1. Yang Da-Peng, Li Ying-Ai, Yang Xu-Xin, Du Yong-Hui, Ji Xiao-Rui, Gong Xi-Liang, Su Zuo-Peng, Zhang Tie-Chen, Chinese Physics Letters, 24, 1088-1091, (2007)

ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ И ДОЗИМЕТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КЕРАМИК ОКСИДА МАГНИЯ С ПРИМЕСЬЮ ЦЕРИЯ

Шмелева А.Е.[1], Штанг Т.В.[1], Никифоров С.В.[1], Лисицын В.М.[2]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Томский политехнический университет, г. Томск, Россия
E-mail: Nastya2001_2001@mail.ru

LUMINESCENT AND DOSIMETRIC PROPERTIES OF MAGNESIUM OXIDE CERAMICS WITH AN IMPURITY OF CERIUM

Shmeleva A.E.[1], Shtang T.V.[1], Nikiforov S.V.[1], Lisitsyn V.M.[2]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia
[2)] Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russia

The effect of cerium impurity on the shape of the curve and kinetic parameters of TL of magnesium oxide ceramics obtained in a fast electron beam is revealed.

Керамики оксида магния (MgO) являются перспективными материалами для высокодозной дозиметрии ионизирующих излучений. Одним из способов получения керамик является их синтез в потоке быстрых электронов [1]. Указанный способ позволяет в матрицу оксида магния вводить различные примеси. Известно, что одной из люминесцентно-активных примесей является примесь ионов церия. Термолюминесцентные (ТЛ) свойства керамик оксида магния, легированных церием и синтезированных в потоке быстрых электронов, до настоящего времени не исследовались.

Целью настоящей работы является сравнительный анализ ТЛ свойств керамик номинально чистого оксида магния и оксида магния, легированного церием.

Для синтеза керамик шихта, содержащая нанопорошок оксида магния, подвергалась облучению электронами с энергией 1.4 МэВ и плотностью мощности 23 кВт/см2 от ускорителя ЭЛВ-6 (ИЯФ СО РАН, г. Новосибирск). Для синтеза керамик, легированных примесью церия, в шихту добавляли активатор в виде Ce_2O_3 (1%).

Для возбуждения ТЛ образцы облучались при комнатной температуре импульсным электронным пучком (60 А/см2, 2 нс) ускорителя «РАДАН ЭКСПЕРТ» с энергией электронов 130 кэВ. ТЛ измерялась при линейном нагреве со скоростью 2 К/с.

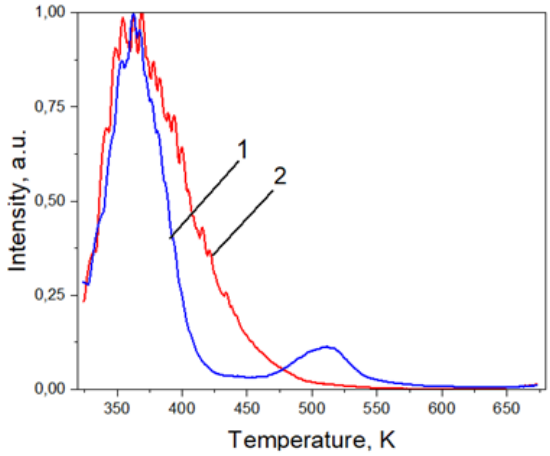


Рис. 1. Кривые ТЛ номинально чистой керамики оксида магния (1) и керамики оксида магния с примесью церия (2). Доза облучения 30 кГр

Кривая ТЛ номинально чистых керамик MgO содержит два пика: большей интенсивности при 362 К и меньшей интенсивности при 510 К. Форма кривой ТЛ керамики с примесью церия изменяется - наблюдается лишь один широкий пик при 362 К .

Для определения кинетических параметров ТЛ применялся метод разложения кривых на элементарные пики с помощью уравнения, описанного в работе [2]. Результаты разложения показали, что пик ТЛ при 362 К для номинально чистой керамики обусловлен одной ловушкой с энергией активации 0,70 эВ и частотным фактором 6,1·108 с-1. Широкий пик ТЛ керамики MgO, легированной церием, содержит две ловушки с энергиями активации 0,70 эВ и 0.72 эВ и частотными факторами 6,3·108 с-1 и 6,4·107 с-1.

В работе также обсуждаются дозовые зависимости ТЛ пиков исследуемых образцов.

1. С.В. Никифоров [и др]. Люминесцентные и дозиметрические свойства керамик оксида магния, синтезированных в потоке высокоэнергетических электронов // (Письма в ЖТФ.), (2022.), (том 48, вып. 11.), (С. 8-11.)
2. G. Kitis, J. M. Gomez-Rosz, J. W. N. Tuyn. Thermoluminescence glow-curve deconvolution functions for first, second and general orders of kinetics // (J. Phys. D: Appl. Phys.), (1998.) , (V. 31.), (Pp. 2636–2641.)

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ МНОЖЕСТВА ЗАСТОЙНЫХ ТОЧЕК В ЗАВИСИМОСТИ ОТ УГЛОВОЙ СКОРОСТИ ВРАЩЕНИЯ ЖИДКОСТИ НА ОДНОЙ ИЗ ГРАНИЦ

Просвиряков Е.Ю.[1, 2], Соколов А.С.[1]
[1)] Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Российская Федерация.
[2)] Институт машиноведения Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург, Российская Федерация.
E-mail: zwaarfolk@gmail.com

THE MAIN RESULTS OF THE STUDY OF THE SET OF STAGNANT POINTS DEPENDING ON THE ANGULAR VELOCITY OF ROTATION OF THE FLUID ON ONE OF THE BOUNDARIES

Prosviryakov E.Yu.[1, 2], Sokolov A.S.[1]
[1)] Ural Federal University named after the First President of Russia B. N. Yeltsin, Ekaterinburg, Russian Federation.
[2)] Institute of Engineering Science, Urals Branch, Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russian Federation.

We study the nonisothermal convection of a viscous incompressible fluid depending on various boundary conditions chosen as parameters in numerical integration. A set of stagnation points has been constructed, the main parameter of which is the angular velocity at the lower boundary.

Крупные водные массивы издревле привлекали внимание исследователей по всему миру. Поначалу это было обусловлено задачами выживания, но впоследствии это стало залогом технологического развития. Многие великие умы создавали целые разделы науки исследуя движение жидкости. К ним относятся Ньютон, Пуанкаре и др. [1,2]. Заметим, что ввиду сложности описания, исследования, посвященные потоку неизотермической вязкой несжимаемой жидкости, появились сравнительно недавно [3]. В настоящее время в России данная проблема изучается в работах [4,5].

В данной работе рассматривается уравнение Навье-Стокса в приближении Буссинеска (или уравнения Обербека-Буссинеска) представляющее из себя систему дифференциальных уравнений в частных производных, описывающих поток вязкой несжимаемой жидкости в неоднородном тепловом поле. В работе представлены решения системы с полем скоростей описанным соотношениями $V_x=U(z)–w(z)y$, $V_y=V(z)+w(z)x$. Сдвиговое конвективное течение, заданное таким образом, при определенных граничных условиях может иметь особые застойные точки – точки, в которых скорость потока по одной из координат равна нулю.

Используя методы численного моделирования построено множество из решений системы Обербека-Буссинеска, имеющих застойные точки. Одним из

главных параметров для построения данного множества является угловая скорость потока на нижней границе. В работе проведен анализ множества застойных точек, построенного таким образом.

1. Newton I. Opera quae exstant omnia, Faksimile-Neudruck der Ausgabe von Samuel Horsley, London 1779-1785 in funf Banden. Band 1, 4. Stuttgart-Bad Cannstatt, Friedrich From- mann Verlag (Gunther Holzboog), 1964, xx+592 pp. (In German)
2. Poincaré H. Cinématique et mécanismes. Potentiel et mécanique des fluides, Cours professé à la Sorbonne. Paris, G. Carré et C. Naud, 1899, iv+385 pp. (In French)
3. Гершуни Г.З., Жуховицкий Е.М. Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости. – М.: Наука, 1972. – 392 с.
4. Prosviryakov E. Yu. Dynamic equilibria of a nonisothermal fluid // Вестник Самарского государственного технического университета. Серия: Физико-математические науки. 2018. Т. 22, № 4. С. 735-749. https://doi.org/10.14498/vsgtu1651
5. Prosviryakov E. Yu. A new exact solution for convective flows of a rotating viscous incompressible fluid // AIP Conference Proceedings, 2018, vol. 2053, iss. 1, 020012. https://doi.org/10.1063/1.5084358

МИКРОМАГНИТНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПЕРЕМАГНИЧИВАНИЯ В ТОНКИХ АНТИФЕРРОМАГНИТНЫХ ПЛЁНКАХ

Солнцев С. Д.[1], Москалев М. Е.[1]
[1)] Уральский Федеральный Университет, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: solnseses@gmail.com

MICROMAGNETIC SIMULATION OF MAGNETIZATION PROCESSES IN ANTIFERROMAGNETIC THIN FILMS

Solntsev S.D.[1], Moskalev M.E.[1]
[1)] Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia

In this work we use the OOMMF micromagnetic simulation package to simulate magnetization processes in antiferromagnetic thin films. The influence of the magnetic anisotropy constant and exchange stiffness of the antiferromagnet on the magnetic susceptibility and the critical fields is studied.

До недавнего времени вся концепция прикладных магнитных сред, будь то магнитные устройства памяти или магнитные сенсоры, была сосредоточена вокруг ферромагнитных материалов [1]. Их антиферромагнитные аналоги считались непригодными для таких целей: их скомпенсированные спиновые структуры, антипараллельные или неколлинеарные, приводят к нулевой суммарной намагниченности, что делает проблематичным определение их магнитного состояния; не менее сложной задачей считалось управление им [2]. В последнее десятилетие наблюдается растущее осознание того, что то, что раньше считалось недостатками антиферромагнетиков, на самом деле может быть преимуществом: в последнее время многие исследования сосредоточены на динамике сверхбыстрых процессов перемагничивания и уникальных магнитных спин-транспортных эффектов, наблюдаемых в антиферромагнетиках [3].

Одним из неотъемлемых аспектов современных исследований в области магнетизма конденсированных сред является микромагнитное моделирование. Данный подход, в частности, позволяет предсказать влияние различных характеристик антиферромагнитного материала на наблюдаемые магнитные свойства.

В данной работе при помощи программного пакета микромагнитного моделирования OOMMF [4] создана модель антиферромагнитных плёночных структур. В рамках данной модели нами исследуются процессы перемагничивания данных структур, позволяющие оценить влияние различных характеристик антиферромагнитного материала, таких как константа его магнитной анизотропии и обменная жёсткость, на магнитную восприимчивость и величину критических полей в плёночных антиферромагнетиках.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (РНФ), проект № 22-22-00814.

1. I. Žutic, J. Fabian, and S. Das Sarma, Spintronics: Fundamentals and applications, Rev. Mod. Phys. 76, 323-410 (2004).
2. C. Song, Y. You, X. Chen, X. Zhou, Y. Wang, and F. Pan, How to manipulate magnetic states of antiferromagnets, Nanothechnology 29, 112001 (2018).
3. V. Baltz, A. Manchon, M. Tsoi, T. Moriyama, T. Ono, and Y. Tserkovnyak, Antiferromagnetic spintronics, Rev. Mod. Phys. 90, 015005 (2018).
4. Donahue, M. (1999), OOMMF User's Guide, Version 1.0, - 6376, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD, [online], https://doi.org/10.6028/NIST.IR.6376 (Accessed February 28, 2023).

ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫЕ СПЛАВЫ CoCrFeNi: СТРУКТУРА И ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

Стерхов Е.В.[1], Быков В.А.[1, 2], Сипатов И.С.[1, 2]
[1)] Институт металлургии УрО РАН
[2)] Уральский федеральный университет
E-mail: wildrobert@gmail.com

HIGH-ENTROPY ALLOYS CoCrFeNi: STRUCTURE AND THERMAL PROPERTIES

Sterkhov E.V.[1], Bykov V.A.[1, 2], Sipatov I.S.[1, 2]
[1)] Institute of Metallurgy UB RAS
[2)] Ural Federal University

A comprehensive experimental study of the thermophysical properties and structure of high-entropy CoCrFeNi alloys in the initial state obtained by electric arc melting and in the crystalline state after long-term high-temperature annealing has been carried out.

Высокоэнтропийные сплавы (ВЭС) в настоящее время представляют большой исследовательский интерес в области физики конденсированного состояния, материаловедения и техники [1,2]. В отличие от обычных сплавов, которые содержат один и редко два базовых элемента, ВЭС содержат несколько основных элементов, причем возможное количество ВЭС-композиций значительно больше, чем у обычных бинарных и трехкомпонентных сплавов. В ходе всестороннего изучения ВЭС возникла основная нерешенная фундаментальная проблема – какой микроскопический механизм отвечает за формирование однофазной структуры и как эта структура влияет на основные функциональные характеристики ВЭС. Среди многообразия высокоэнтропийных сплавов система CoCrFeNi занимает особое место. В данной системе удается реализовать однофазное состояние не только для эквиатомного состава, но и для большого количества концентраций. В тоже время для системы CoCrFeNi хорошо изученной с точки зрения механических свойств систематические исследования теплофизических свойств не проводились. В работе проведено комплексное экспериментальное исследование теплофизических свойств высокоэнтропийных сплавов CoaCrbFecNi1−a−b−c (a=20-40 b=20-40 c=20-40 ат. %) в исходном состоянии, полученным электродуговым сплавлением и в кристаллическом состоянии после длительного высокотемпературного отжига. Согласно проведенному рентгенно-структурному анализу структура полученных сплавов представляет собой однофазный твердый раствор на основе ГЦК решетки. Получены данные по температуропроводности, теплоемкости и теплопроводности сплавов CoaCrbFecNi1−a−b−c (a=20-40 b=20-40 c=20-40 ат. %) в закаленном и отожженном состоянии в интервале температур

от комнатной до 1300 K. Значения исследованных теплофизических свойств имеют величины близкие к сплавам типа Инконель [3] и слабо зависят от варьирования компонентов сплава CoCrFeNi. Подтверждена стабильность структуры (однофазного раствора указанных сплавов после длительного изотермического отжига (температура отжига – 1200 K, время отжига – 10 часов).

Работа выполнена при финансовой поддержки Российского научного фонда (№ 23-22-00137)

1. Yong Zhang, Ting Ting Zuo et al., Progress in Materials Science, 61, 1–93, (2014)
Miracle D.B., Senkov O.N., Acta Materialia, 122, 448-511, (2017)
https://www.specialmetals.com/documents/technical-bulletins/inconel/

САМОДИФФУЗИЯ В ГРАНИЦАХ ЗЕРЕН В НАНОКРИСТАЛЛЕ НИКЕЛЯ

Ступак М.Е.[1], Уразалиев М.Г.[1], Попов В.В.[1]
[1)] Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: shay92@yandex.ru

GRAIN BOUNDARY SELF-DIFFUSION IN NANOCRISTALLINE NIKEL

Stupak M.E.[1], Urazaliev M.G.[1], Popov V.V.[1]
[1)] M.N. Mikheev Institute of Metal Physics of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences

An atomistic simulation of grain boundaries (GBs) in Ni has been carried out in nanocrystalline state. The direct MD method was used to study the self-diffusion in GBs.

Объемная доля границ зерен в нанокристаллических материалах достаточно велика. Поэтому процессы зернограничной диффузии в них могут оказывать значительное влияние на эволюцию структуры. Компьютерное моделирование границ зерен позволит прогнозировать эволюцию структуры и поведение границ зерен на атомном уровне в нанокристалле.

Расчеты проводились с использованием программы LAMMPS [1]. Атомистическое взаимодействие атомов никеля описывалось с помощью потенциала погруженного атома [2]. С помощью программы ATOMSK [3] получена модель нанокристалла в гранецентрированном плотноупакованном никеле (рис.1.), содержащая набор различных границ зерен. Нанокристалл содержит около 700000 атомов. Полученную модель нанокристалла нагревали и подвергали выдержке при постоянной температуре (отжигу) в рамках классической молекулярной динамики (МД). Для установки нужной температуры использовали термостат Нозе-Гувера в изотермо-изобарическом ансамбле.

Методом прямой МД были рассчитаны эффективные коэффициенты самодиффузии в нанокристалле никеля. Зернограничная самодиффузия рассчитана на основании эффективного коэффициента самодиффузии нанокристалла с помощью приближенного уравнения Максвелла-Гарнетта.

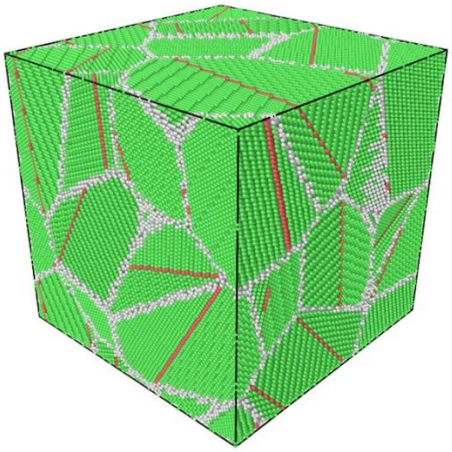


Рис. 1. Модель нанокристалла никеля, визуализированная с помощью анализатора структуры PTM (Polyhedral template matching) [4] в программе OVITO [5].

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России (тема «Функция» номер госрегистрации г.р. № 122021000035-6).

При проведении работ был использован суперкомпьютер «Уран» ИММ УрО РАН

1. S. Plimpton, J. Comp Phys 117, 1-19 (1995).
2. L.K. Béland, C. Lu, Y.N. Osetskiy, G.D. Samolyuk, A. Caro, L. Wang, and R.E. Stoller (2016), "Features of primary damage by high energy displacement cascades in concentrated Ni-based alloys", Journal of Applied Physics, 119(8), 085901. DOI: 10.1063/1.4942533.
3. "Atomsk: A tool for manipulating and converting atomic data files" Pierre Hirel, Comput. Phys. Comm. 197 (2015) 212-219 doi:10.1016/j.cpc.2015.07.012
4. P. M. Larsen et al. Robust Structural Identification via Polyhedral Template Matching Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 24, 055007 (2016) doi:10.1088/0965-0393/24/5/055007
5. A. Stukowski, Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 18, 015012 (2010).

ЭФФЕКТ МАГНИТООТРАЖЕНИЯ СВЕТА И ЕГО СВЯЗЬ С МАГНИТОСТРИКЦИЕЙ В ФЕРРИТ-ШПИНЕЛИ $MnFe_2O_4$

Суржиков Е.А.[1, 2], Сухоруков Ю.П.[1], Телегин А.В.[1]
[1)] Институт физики металлов им. М. Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, Екатеринбург, Россия
[2)] ФГАОУ ВО «УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», Екатеринбург, Россия
E-mail: surzhikov@imp.uran.ru

THE RELATION OF MAGNETOREFRACTION EFFECT TO MAGNETOSTRICTION IN $MnFe_2O_4$ FERRITE-SPINEL

Surzhikov E.A.[1, 2], Sukhorukov Yu.P.[1], Telegin A.V.[1]
[1)] M. N. Mikheev Institute of Metal Physics of Ural Branch of RAS, Yekaterinburg, Russia
[2)] Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia

Optical and magnetooptical properties of single crystals of $MnFe_2O_4$ ferrite-spinel have been studied. The effect of magnetoreflection of light, as high as 1%, was detected in the crystal at wavelength 3 mkm. The correlation of field dependences of magnetoreflection and magnetostriction was obtained.

Установление корреляции магнитоупругих и магнитооптических (МО) свойств в ферримагнитной шпинели $CoFe_2O_4$ с большой величиной магнитострикции позволило определить новое направление в физике магнитных явлений – стрейн-магнитооптика [1]. Для лучшего понимания природы стрейн-магнитооптики необходимо детальное изучение особенностей МО свойств других магнитострикционных материалов. Например, феррит-шпинель $MnFe_2O_4$, которая близка по физико-химическим свойствам к $CoFe_2O_4$, но имеет меньшую величину магнитострикции [2].

Целью работы являлось измерение спектров отражения и магнитоотражения света для монокристаллов $MnFe_2O_4$ в инфракрасном диапазоне длин волн.

Образцы монокристаллов феррит-шпинели были получены методом зонной плавки и аттестованы методами рентгеновской дифракции и электронной микроскопии. На рис. 1 приведён спектр отражения для монокристалла $MnFe_2O_4$. Спектр отражения формируется вкладом фононов в области длин волн $\lambda>14$ мкм, частотно-независимой частью ($R\sim17\%$) в области $3<\lambda<12$ мкм и краем фундаментального поглощения при $\lambda<2.5$ мкм.

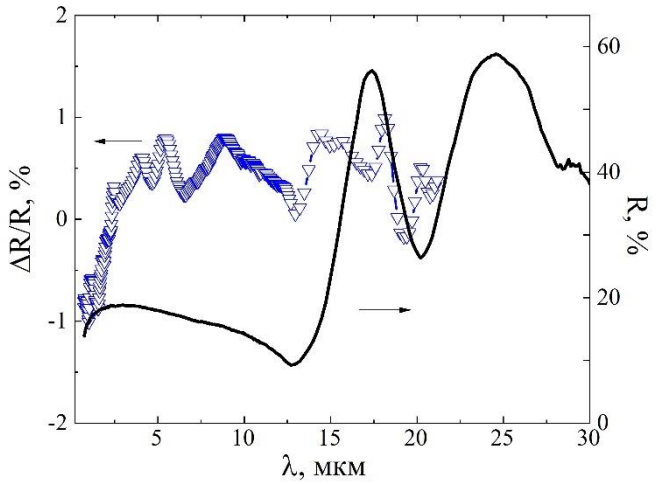


Рис. 1. Спектры отражения R и магнитоотражения ΔR/R монокристалла феррит-шпинели $MnFe_2O_4$ при комнатной температуре в магнитном поле 3 кЭ, приложенном вдоль оси [100].

Эффект магнитоотражения (ΔR/R) - относительное изменение интенсивности отражённого света под действием магнитного поля, был измерен в поле 3 кЭ, приложенном вдоль кристаллографической оси [100] кристалла. Показано, что по абсолютной величине ΔR/R не превышает 1 % (Рис.1), что в 5–7 раз меньше, чем ΔR/R для $CoFe_2O_4$. Полученные данные согласуются с меньшей величиной магнитострикции в $MnFe_2O_4$ ($\lambda_{100} \sim 60*10^{-6}$) по сравнению с $CoFe_2O_4$ ($\lambda_{100} \sim 550*10^{-6}$). Анализ спектров R кристалла методом Крамерса-Кронига позволил рассчитать относительное изменение показателя преломления под действием магнитного поля (магниторефрактивный эффект) $\Delta n/n \approx +0.02$ % в слабо-дисперсионном участке спектра ($3<\lambda<12$ мкм), а также спектр магнитопоглощения света, максимальная величина которого составила почти 5 %, в магнитном поле 3 кЭ.

В работе было получено качественное подобие хода полевых зависимостей ΔR/R и магнитострикции кристаллов. Это подтверждает, что в $MnFe_2O_4$ имеет место взаимосвязь магнитоупругих и МО свойств, которая ранее наблюдалась в $CoFe_2O_4$ [1]. Таким образом, появление эффекта ΔR/R и его сложная спектральная зависимость в монокристаллах $MnFe_2O_4$ связана с и чувствительностью электронной структуры шпинели к магнитоупругим деформациям.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (тема «Спин» № 122021000036–3).

1. Yu.P. Sukhorukov, A.V. Telegin, N.G. Bebenin, et. al. Magnetochemistry 8, 135 (2022).
2. R. M. Bozorth, E. F. Tilden, and A. J.Wiliams, Phys. Rev. 99, 1788 (1955).

ДИНАМИКА РЕШЕТКИ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МАГНИЙ-АЛЮМИНИЕВОЙ ШПИНЕЛИ С НЕУПОРЯДОЧЕННЫМ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ КАТИОНОВ ПО ПОЗИЦИЯМ

Сушанек Л.Я.[1], Щапова Ю.В.[1, 2], Киряков А.Н.[2], Зацепин А.Ф.[2]
[1)] Институт Геологии и Геохимии имени академика А.Н. Заварицкого УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2)] Уральский Федеральный Университет имени Первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
E-mail: lev.sushanek@gmail.com

LATTICE DYNAMICS AND OPTICAL PROPERTIES OF MAGNESIUM-ALUMINUM SPINEL WITH A DISORDERED CATION DISTRIBUTION OVER POSITIONS

Sushanek L.Y.[1], Shchapova Y.V.[1, 2], Kiryakov A.N.[2], Zatsepin A.F.[2]
[1)] Zavaritsky Institute of Geology and Geochemistry, Yekaterinburg, Russia
[2)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The influence of cation disordering on Raman, photoluminescence and optical absorption spectra were analyzed at various temperatures.

Шпинель $MgAl_2O_4$ представляет интерес для исследования в связи со своими радиационными, химическими, термическими свойствами и разработкой на ее основе функциональных материалов. Обращение структуры, т.е. нарушение упорядоченного распределения катионов по позициям, шпинели позволяет управлять его свойствами. Ангармонизм колебаний – одна из важных характеристик динамики решетки и проявляется в спектрах комбинационного рассеяния света в конечной ширине колебательных мод и изменении их энергии, интенсивности, ширины в зависимости от температуры.

Цель настоящей работы – определение влияния катионного разупорядочения на ангармонизм колебаний решетки и оптические свойства шпинели $^{IV}(Mg_{1-\delta}Al_\delta)^{VI}(Al_{2-\delta}Mg_\delta)O_4$, где δ – параметр разупорядочения, методом спектроскопии КР в диапазоне температур T=77-873 K. Измерения выполнены на спектрометре Horiba LabRam HR 800 Evolution с термоприставкой Linkam THMS 600. Исследуемые образцы – монокристаллы природной низкопримесной шпинели (Кухилал, Юго-Западный Памир) и синтетической керамики $MgAl_2O_4$, полученной методом горячего прессования; для частичного разупорядочения природных образцов использован лабораторный отжиг на воздухе (700-760 °C, 3 часа) с закалкой в воде.

Для спектров шпинели с упорядоченным распределением катионов, δ=0, характерны моды 311 (F_{2g}), 408 (E_g), 670 (F_{2g}), 727 (A_{1g}), 770 $см^{-1}$ (A_{1g}). В спектрах шпинели с $0 < \delta < 1$ дополнительно регистрируются моды 720 (A_{1g}) и

низкоинтенсивная мода 220 $см^{-1}$ [1]. Температурные зависимости положения и ширины колебательных мод демонстрируют различия в зависимости от степени катионного разупорядочения. Положение моды E_g деформационных колебаний тетраэдрических группировок MgO_4 при 408 $см^{-1}$ наименее чувствительно к катионному перемешиванию: значения изобарического параметра при T=293K для упорядоченной природной и неупорядоченной синтетический шпинели близки (-0.0111 и -0.0108 $см^{-1}/K$, соответственно); значение указанного параметра для дополнительной E_g моды 380 $см^{-1}$ почти в два раза выше (-0.0199 $см^{-1}/K$). Анализ ангармонизма колебаний по известному соотношению показал, что для моды 408 $см^{-1}$ вклад фонон-фононного взаимодействия практически не зависит от разупорядочения и близок к нулю. Установлена роль размерного фактора и взаимодействия фононов в наблюдаемом ангармонизме колебаний мод различной симметрии при перемешивании катионов. Проанализировано влияние разупорядочения катионной подрешетки на спектры фотолюминесценции и оптического поглощения шпинели при различных температурах.

Работа выполнена в рамках Госзадания ИГГ УрО РАН (№ 123011800012-9) с использованием оборудования ЦКП «Геоаналитик» ИГГ УрО РАН, дооснащение и развитие которого поддержано грантом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, Соглашение № 075 -15-2021-680.

1. Минералы-концентраторы d- и f-элементов: локальные спектроскопические и ЛА-ИСП-МС исследования состава, структуры и свойств, геохронологические приложения: монография / Ю.В. Щапова и др./ под ред. Вотякова С.Ю. – из-во СО РАН, 2020. – 424 с.

ИССЛЕДОВАНИЕ СТАБИЛЬНОСТИ И МЕТОДОВ КОНТРОЛЯ СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЙ ПОВЕРХНОСТНЫХ НАНОСИСТЕМ В РЕЖИМЕ ПЕРЕДАЮЩИХ И ЛОГИЧЕСКИХ УСТРОЙСТВ

Кашин И.В.[1], Сырников Е.В.[1]
[1)] Кафедра Теоретической физики и прикладной математики, Уральский федеральный университет, ул. Мира 19, 620002 Екатеринбург, Россия.
E-mail: e.syrnikov105@gmail.com

STABILITY AND BOUND STATES CONTROL RESEARCH IN RELATION TO SURFACE NANOSYSTEM BASED TRANSMITTING AND LOGICAL DEVICES

Kashin I.V.[1], Syrnikov E.V.[1]
[1)] Theoretical Physics and Applied Mathematics Department, Ural Federal University, Mira Street 19, 620002 Ekaterinburg, Russia.

We suggest research of surface nanosystems based transmitting and logic devices. These are systems of individual transition metal atoms adsorbed to the surface. We consider methods of bound states control and stability of the systems.

С момента изобретения электронно-вычислительных машин их мощность наращивалась путём увеличения количества транзисторов, размещаемых на кристалле интегральной схемы, и увеличения тактовой частоты процессора. Сегодня процессоры могут насчитывать до 50 млрд транзисторов в схемах, а их размер достигает нескольких нанометров.

Одним из подходов к дальнейшему наращиванию вычислительных мощностей является использование спиновых степеней свободы отдельных атомов и частиц для реализации как логических устройств, так и модулей памяти, обладающих высокой емкостью и низким энергопотреблением. Принцип работы таких устройств основан на обменном взаимодействии локализованных магнитных моментов атомов.

Целью данной работы является исследование методов контроля связанных состояний и оценка стабильности работы передающих и логических устройств, представляющих из себя системы отдельных атомов переходного металла, адсорбированных на поверхность.

Подобные устройства функционируют следующим образом: «входами» логического или передающего устройства являются ферромагнитные «островки», которые могут быть намагничены с импульсным магнитным полем. Информация о их состоянии, посредством обменного взаимодействия, передаётся через атомные цепи в область «затвора» - атома, намагниченность которого считывается. Таким образом, в зависимости от намагниченностей «входов», можно получать логические функции.

Для моделирования таких систем используется гибридная квантово-механическая модель, включающая в себя как квантовые, так и «классические» спины. Классические спины – «входы» устройства представляются в виде трёхмерного вектора K = (0, 0, K) произвольной длины, параллельного оси z. Передачей сигнала считается изменение среднего значения оператора z-проекции спина «выходного» атома.

В работе рассматриваются системы, описываемые моделью Гейзенберга. Для их решения составляется матрица гамильтониана и находятся его собственные значения методом точной диагонализации.

В ходе работы было получено выражение для изменения магнитной энтропии систем, состоящих из нескольких атомов. Был разработан алгоритм введения хаотических воздействий в систему и проведено исследование устойчивости систем к различным конфигурациям модели шумового воздействия. Был введён формализм «неаккуратного эксперимента», который позволяет оценить стабильность систем к отклонению намагниченностей «входов», относительно оси z, от их «идеального» положения, благодаря чему были определены «рабочие зоны» рассматриваемых устройств.

1. Realizing All-Spin–Based Logic Operations Atom by Atom / A. A. Khajetoorians [и др.], Science — 2011. — Май.

GADOLINIUM OXIDE SINGLE CRYSTALS: OPTICAL PROPERTIES AND RADIATION RESISTANCE

Tavrunov D.A.[1], Nikolaev R.E.[2], Tarasenko M.S.[2], Naumov N.G.[2], Pustovarov V.A.[1]

[1)] Institute of Physics and Technology, Ural Federal University, 620002, Yekaterinburg, Russia

[2)] Institute of Inorganic Chemistry, Siberian Branch of the Russian Academy of Science, 630090, Novosibirsk, Russia

E-mail: dmitry.tavrunov@gmail.com

Large-size high optical quality Gd2O3:Tb single crystals with cubic polymorph were grown by the Czochralski method for the first time. Optical and luminescence properties, energy transfer as well as radiation resistance to high-energy electron beam were studied.

Increased interest in the synthesis and study of the properties of Gd_2O_3 oxide is caused by the prospect of its use in medical diagnostics as contrast agents in ultrasound and magnetic resonance imaging, computed tomography, radiotherapy and Gd-neutron capture therapy for cancer, in biomedicine, fluorescence microscopy and spintronics [1, 2]. However, all experimental studies of gadolinium oxide known in the literature were performed on nano- or microcrystalline powders.

In this report, large-size high optical quality Gd_2O_3 single crystals were grown from solution at T = 1145 °C by the Czochralski method for the first time in the world science practice. XRD analysis showed that the crystal structure is characterized by one cubic phase. Absorption spectra and luminescence properties upon excitation with UV photons or X-ray in Gd_2O_3 doped with impurity Tb^{3+} ion were studied in temperature range of 90–295 K. The absorption spectrum is determined by electronic transitions in the Gd^{3+} ion (spectral region of 245–315 nm) and interband electron transitions below 240 nm. Inner-configurational radiation f-f transitions from the $^5D_4$ level in Tb^{3+} ion are clearly manifested upon both UV- and X-ray excitation. At the same time, $^6P_J \rightarrow {}^8S_{1/2}$ radiative transitions in Gd^{3+} ions are completely absent. This fact indicates the high efficiency of nonradiative energy transfer from Gd^{3+} to Tb^{3+} ions. Thermo-luminescent spectroscopy shows the absence of charge carrier trapping centers, which proves the perfection of its crystal structure. The crystal under study shows a high radiation resistance to the action of a high-energy (E = 10 MeV, D = 105 kGy) electron beam. However, the effects of irradiation appear only in the photoluminescence excitation (PLE) spectra and thermally stimulated luminescence.

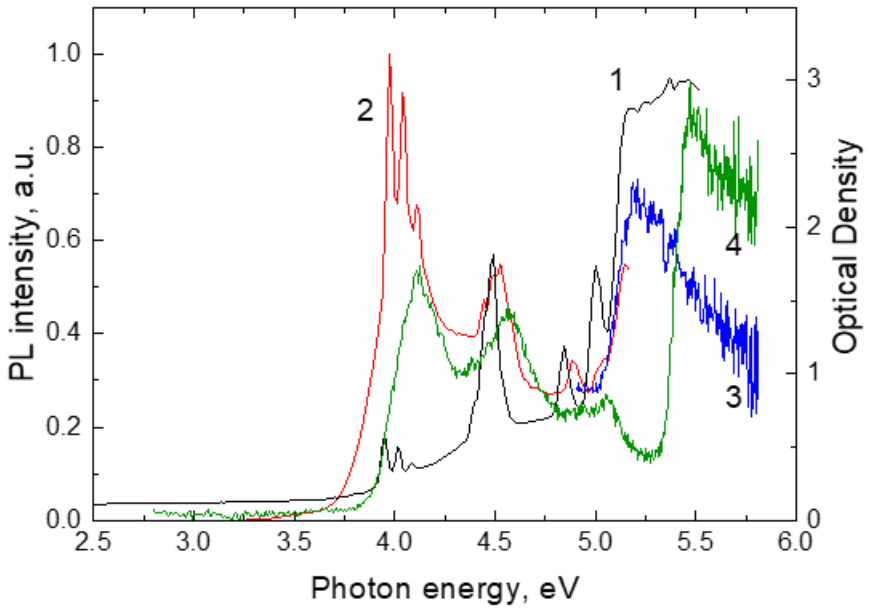


Рис. 1. Comparison of the absorption spectrum (1) and the PLE spectra (2 – 4) monitoring emission 542.5 nm (5D4 → 8S1/2 radiative transitions) of Gd2O3:Tb single crystal, T = 295 K (1 – 3) and 90 K (4)

The work was partial supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (through the basic part of the government mandate, project No. FEUZ-2023-0013) and Russian Science Foundation (project No. 22-43-02079).

1. P. Sharma, W.G. Brown, S. Santra, E. Scott, H. Ichikawa, Y. Fukumori, B.M. Moudgil, Gd nanoparticulates: from magnetic resonance imaging to neutron capture therapy, Adv. Power Technol. 18 (2007) 663–698. https://doi.org/10.1163/156855207782515030
2. E.S. Trofimova, V.A. Pustovarov, A.F. Zatsepin, Energy conversion in Gd2O3 nanocrystals doped with Er3+ ions, Phys. Solid State 61 (2019) 763–767. https://doi.org/10.1134/S1063783419050366

THE ROLE OF FLUID VELOCITY ON THE SHAPE OF DENDRITIC TIPS

Alexandrov D.V.[1], Kao A.[2], Galenko P.K.[1, 3], Lippmann S.[3], Starodumov I.O.[4], Demange G.[5], Toropova L.V.[3, 6]

[1)] Laboratory of Multi-Scale Mathematical Modeling, Department of Theoretical and Mathematical Physics, Ural Federal University, Lenin ave., 51, Ekaterinburg, 620000, Russian Federation

[2)] Centre for Numerical Modelling and Process Analysis, University of Greenwich, Old Royal Naval College, Park Row, London SE10 9LS, UK

[3)] Otto-Schott-Institut für Materialforschung, Friedrich-Schiller-Universität-Jena, 07743 Jena, Germany

[4)] Laboratory of Multiphase Physical and Biological Media Modeling, Ural Federal University, Lenin ave., 51, Ekaterinburg, 620000, Russian Federation

[5)] GPM, CNRS-UMR 6634, University of Rouen Normandy, 76801, Saint Étienne Du Rouvray, France

[6)] Laboratory of Mathematical Modeling of Physical and Chemical Processes in Multiphase Media, Lenin ave., 51, Ekaterinburg, 620000, Russian Federation

E-mail: l.v.toropova@urfu.ru

This study is concerned the shape of dendritic tip grown from an undercooled melt in the presence of fluid velocity. The tip shape function is derived and tested against numerical simulations when a forced convection plays a decisive role.

The analytical expressions describing two-dimensional growth dendritic crystals tip shape according to the theory developed by Alexandrov and Galenko [1] reads as [1] $z_{(AG)}(x)=-(b_S(x)*x^2+b_L(x)*x^{(5/3)})/(b_S(x)*x^{(1/3)}+b_L(x)*x^{(-1/3)})$.

The stiching functions $b_S(x)$ and $b_L(x)$ satisfying the limiting conditions can be chosen in different manners. So, for example, following the article [2], these functions can be written in the form of $b_S(x)=\exp(-1/x^{(2k)})$, $b_L(x)=\exp(-x^{(2k)})$.

Expression for $z_{(AG)}$ should be rewritten as $z(x)=\text{alpha} * z_{(AG)}(x)$, where alpha stands for the scaling parameter. Dealing with a convective flow (U is the flow velocity far from the crystal) we obtain $\text{alpha}=\text{alpha}_U*(1+\text{beta}_U*(U-U_{(ref)})$. Here alpha_U represents the shape constants at reference values of fluid velocity $U_{(ref)}$, whereas beta_U stands for the shape correction coefficients respectively taking the effects of flow.

Next, the shapes of dendritic crystals grown from a single-component nickel melt were simulated by Kao et al. [3] using the enthalpy method for different flow velocities U (see Figure 1, upper panel). The method used an adaptive cell size and scaled radius of curvature approach. The tip radius, highlighted in Fig. 1(a), is then defined as specified number of computational cells chosen to minimise numerical error [4]. The calculations were performed in a moving frame of reference and solved the fully coupled transient equation set for solidification and fluid flow. The computational domain was square with 1200 × 1200 computational cells and the moving frame was specified at 100 cells. This larger domain ensured that the far field boundary conditions,

representing bulk conditions for flow and temperature, did not influence the solution. Quasi steady state solutions were achieved once the moving frame reached a constant velocity. The shapes of these dendrites (Fig. 1, symbols in lower panel) were compared with expression mentioned above (Fig. 1, solid lines in lower panel). It can be seen that the theory well agrees with the computations.

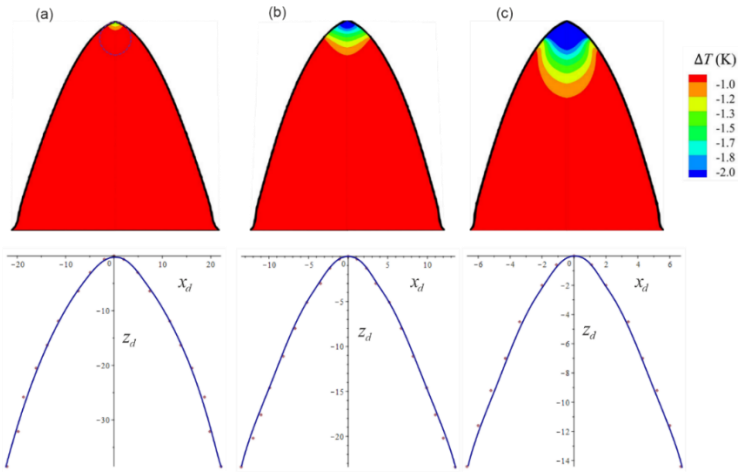


Figure 1. Four-fold nickel dendritic tips [3] (symbols) are compared with theoretical predictions (solid lines) at $alpha_U$ =0.55, $beta_U$ s/m, $U_{(ref)}$=0 and (a) U=0, R=3 μm; (b) U=1.08 m/s, R=1.5 μm; (c) U=8.66 m/s, R=1 μm.

In this paper, we extend the recently developed theory of dendritic crystal tip shape [1,2] to the case of external impacts. Namely, such factor as convective flow has been considered. The main idea to find a shape correction to the expressions derived in Refs. [1,2] is to expand the shape constant alpha into Taylor series in the vicinity of reference point $U_{(ref)}$. Our study demonstrates the workability of such an idea.

L.V.T. acknowledges the financial support from the Russian Science Foundation (project no. 21-79-10012).

1. Alexandrov DV, Galenko PK. 2020 The shape of dendritic tips. Phil. Trans. R. Soc. A 378, 20190243.
2. D.V. Alexandrov, L.V. Toropova, E.A. Titova, A. Kao, G. Demange, P.K. Galenko, M. Rettenmayr. 2021 The shape of dendritic tips: A test of theory with computations and experiments. Phil. Trans. R. Soc. A 379, 20200326.
3. A. Kao, L.V. Toropova, I. Krastins, G. Demange, D.V. Alexandrov, P.K. Galenko. 2020 A Stable Dendritic Growth with Forced Convection: A Test of Theory Using Enthalpy-Based Modeling Methods. JOM 72, 3123-3131.
4. A. Kao, L.V. Toropova, D.V. Alexandrov, G. Demange, P.K. Galenko. 2020 Modeling of dendrite growth from undercooled nickel melt: Sharp interface model versus enthalpy method. J. Phys. Condens. Matter 32, 194002.

ВЛИЯНИЕ ОТЖИГА НА МАГНИТОРЕЗЕСТИВНЫЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИТОВ $(Co_{47}Fe_{42}Zr_{11})_x(MgF_2)_{100-x}$

Трегубова Т.В.[1], Стогней О.В.[1], Габриельс К.С.[1], Макагонов В.А.1, Фошин В.А.[1], Трегубов И.М.[1]

[1)] Воронежский Государственный Политехнический Университет, 394006,Воронеж, 20 лет Октября, , Россия

[2)] Воронежский Государственный Политехнический Университет, 394006,Воронеж, 20 лет Октября, , Россия

E-mail: ttv1507@ya.ru

EFFECT OF ANNEALING ON THE MAGNETORESISTIVE PROPERTIES OF $(Co_{47}Fe_{42}Zr_{11})_x(MgF_2)_{100-x}$ COMPOSITES

Tregubova T. V.[1], Stognei O.V.[1], Gabriels K.S.[1], Makagonov V.A.[1], Foshin V.A.[1], Tregubov I.M.[1]

[1)] Voronezh State Technical University, 394006 Voronezh, 20 let Oktyabrya st., 84, Voronezh, Russia

[2)] Voronezh State Technical University, 394006 Voronezh, 20 let Oktyabrya st., 84, Voronezh, Russia

Magnetic and magnetoresistive properties of $(CoFeZr)_x(MgF_2)_{100-x}$ thin film composites have been investigated in wide range of metal phase concentration (14 ат.% ≤ x ≤ 52 ат.%). The composites were studied in initial state and after heat treatment at different temperatures up to 350 °C.

Образцы тонкопленочных композитов $(Co_{47}Fe_{42}Zr_{11})_x(MgF_2)_{(100-x)}$ получены методом ионно-лучевого распыления составных мишеней. Толщина полученных пленок контролировалась с помощью интерферометра МИИ-4 и составила 1-3 мкм в зависимости от содержания металлической фазы. Элементный состав контролировался с помощью сканирующего рентгеновского микроанализатора JXA-840. Концентрация металлической фазы исследуемой системы меняется в широком диапазоне (14 ат.% ≤ x ≤ 52 ат.%). Электрические и магнитотранспортные свойства композитов исследованы с помощью двухзондового потенциометрического метода.

Электрический порог перколяции в исследуемой системе соответствует концентрации металлической фазы, равной 27 ат.%. Установлено, что доперколяционные композиты проявляют отрицательный магниторезистивный эффект (МС, рис.1). Эффект является изотропным относительно взаимного направления электрического тока и магнитного поля и имеет туннельную природу [1]. Максимальное значение магниторезистивного эффекта достигает величины 3,25 % при 25 ат.% Me, то есть вблизи порога перколяции со стороны диэлектрической области.

Установлено, что магниторезистивный эффект в композитах $(Co_{47}Fe_{42}Zr_{11})_x(MgF_2)_{(100-x)}$ проявляет достаточно высокую термическую стабильность. Термические отжиги, проведенные при 184 °С и 240 °С практически не влияют на величину МС (рис. 1).

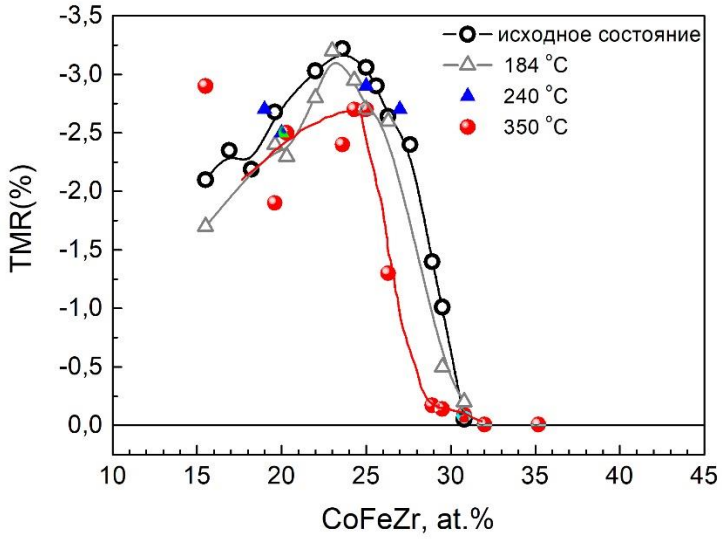


Рис.1 Концентрационная зависимость магнитосопротивления композитов $(Co_{47}Fe_{42}Zr_{11})_x(MgF_2)_{(100-x)}$ в исходном состоянии и после отжигов

Отжиги при 350 °С лишь незначительно уменьшают значения МС в доперколяционной области. Вместе с тем, наблюдается смещение порога перколяции на 3 ат.% в область с меньшей концентрацией металлической фазы (в диэлектрическую область) после отжига при 350 °С. Причиной такого смещения, является образование перколяционных кластеров, формирующихся в результате термического воздействия, вследствие диффузии растворенных в диэлектрической матрице атомов металла. Образование таких кластеров происходит на пороге перколяции, где исходно расстояние между гранулами минимально, а следствием этого, является изменение доминирующего механизма электропереноса с туннельного на металлический, при котором туннельное магнитосопротивление возникать не может.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № FZGM-2023-0006)

1. B. Julsgaard et al., Appl. Phys. Lett., 98, 093101 (2011).

ВЛИЯНИЕ КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ЭФФЕКТОВ НА ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА $CuCo_2S_4$: РАСЧЕТЫ В РАМКАХ DFT+DFMT

Скорняков С.Л.[1, 2], Трифонов И,О.[1, 2]
[1)] Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: trifonov.i@bk.ru

COULOMB CORRELATIONS AND ELECTRONIC STRUCTURE OF $CuCo_2S_4$: A DFT+DFMT STUDY

Skornyakov S.L.[1, 2], Trifonov I.O.[1, 2]
[1)] Institute of Metal Physics, Russian Academy of Sciences-Ural Division, 620041 Yekaterinburg GSP-170, Russia
[2)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Using DFT+DMFT, we study the magnetic and spectral properties of $CuCo_2S_4$. We show weak electronic correlations induce a transformation of the Fermi surface of $CuCo_2S_4$. Computed magnitudes of local and fluctuating magnetic moments, question the spin-fluctuation origin of superconductivity of $CuCo_2S_4$.

В физике твердого тела выделяют две категории сверхпроводников. К первой относят системы, поведение которых описывает теория Бардина-Купера-Шриффера (БКШ). Во вторую категорию выделяют соединения, в которых существенную роль в образовании куперовских пар предположительно играют корреляционные эффекты и спиновые флуктуации [1]. К таковым относятся пниктиды и халькогениды железа (FeSC) [2,3]. Поиск новых сверхпроводящих соединений, чьи свойства также не описываются в рамках теории БКШ, является приоритетным направлением современной науки.

Сверхпроводимость системы $CuCo_2S_4$ (структура шпинели, T_c = 4,2 K) была открыта относительно недавно [4]. К настоящему времени накоплены противоречивые данные касательно симметрии сверхпроводящей щели $CuCo_2S_4$ и роли кулоновских корреляций в формировании куперовских пар [5]. По этой причине исследование влияния корреляционных эффектов на электронную структуру и магнитные свойства $CuCo_2S_4$ представляет бесспорный интерес, являясь важным шагом для понимания механизма сверхпроводящего перехода в достаточно ограниченном списке соединений на основе кобальта (Co). В данной работе кулоновские корреляционные эффекты были исследованы методом DFT+DMFT, объединяющим теорию функционала плотности (DFT) и динамическую теорию среднего поля (DMFT).

В данной работе было установлено, что спектральная функция $CuCo_2S_4$ соответствует металлу и характеризуется широким пиком на уровне Ферми, преимущественно обусловленный вкладами орбиталей Co t_{2g} симметрии. Было

показано, что спектральные функции рассчитываемые как в DFT, так и DFT+DMFT качественно близки, а учет кулоновских корреляций в методе DFT+DMFT может быть описан масштабированием и сдвигом спектральной функции, полученной с помощью DFT. Для количественной оценки корреляционных эффектов была рассчитана перенормировка квазичастичной массы m*/m, значения которой составили 1.18 и 1.22 для t_{2g} и e_g состояний, соответственно. Полученные величины m*/m приблизительно в 2 раза меньше таковых в FeSC системах [2], что иллюстрирует более слабые корреляции в CuCo2S4.

Было установлено, что поверхность Ферми $CuCo_2S_4$ имеет три листа. Несмотря на слабое влияние корреляционных эффектов на спектральные функции, было установлено, что сдвиг неглубоких электронных карманов в направлении W-L-K зоны Бриллюэна (рис.1а) приводит к компактификации третьего листа поверхности Ферми (рис.1б). Получаемое преобразование поверхности Ферми может говорить о важности учета кулоновских корреляций для описания транспортных свойств CuCo2S4.

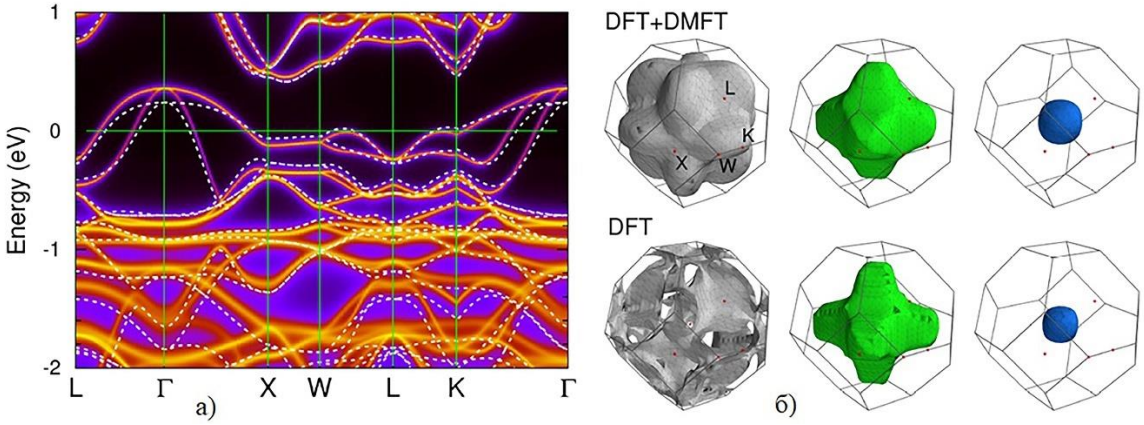


Рис. 1. а): Спектральная функция с угловым разрешением для $CuCo_2S_4$, полученная методом DFT+DMFT (контуры), и методом DFT (пунктирные линии). б): Листы поверхности Ферми $CuCo_2S_4$ полученные методом DFT+DMFT (верхний ряд) для температуры T = 290 K и методом DFT (нижний ряд).

Рассчитанные значений амплитуд флуктуирующего и локального магнитных моментов для 3d состояний кобальта, равные 1 и 0.18 магнетронов Бора, соответственно, существенно меньше характерных значений для FeSC. Полученный результат был интерпретирован как следствие более слабых спиновых флуктуациях в $CuCo_2S_4$. На этом основании было высказано предположение о неприменимости спин-флуктуационного механизма для объяснения образования сверхпроводящих куперовских пар в $CuCo_2S_4$.

Мы благодарим Российский научный фонд за поддержку в рамках проекта 19-12-00012.

1. J. Hirsch, M. Maple, and F. Marsiglio, Physica C 514, 1 (2015).
2. I. A. Nekrasov, N. S. Pavlov, M. V. Sadovskii, JETP Letters 102, 30 (2015).
3. Z. P. Yin, K. Haule, and G. Kotliar, Nat. Mater. 10, 932 (2011).
4. Yu-Ying Jin, Shi-Huai Sun, Yan-Wei Cui, Qin-Qing Zhu, Liang-Wen Ji, Zhi Ren, and Guang-Han Cao Phys. Rev. Materials 5, 074804
5. G. Baskaran, Phys. Rev. Lett. 91, 097003 (2003).

СРАВНИТЕЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ РАСТВОРОВ, ТОНКИХ ПЛЕНОК И ПОРОШКОВ НА ОСНОВЕ БЕНЗОТИЕНОАЦЕНОВ

Трофимова К.Е.[1], Устюжанина Ю.Э., Ищенко А.В.[1], Иргашев Р.А.[2], Вайнштейн И.А.[1]

[1)] НОЦ "Наноматериалы и нанотехнологи», Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина, Екатеринбург, 620002, Россия

[2)] Институт органического синтеза им. Я.И. Постовского, Уральского отделения Российской академии наук, Екатеринбург, 620137, Россия

E-mail: k.e.trofimova@urfu.ru

A COMPARATIVE STUDY OF OPTICAL PROPERTIES OF BENZOTHIENOACENE-BASED SOLUTIONS, THIN FILMS, AND POWDERS

Trofimova K.E.[1], Ustyuzhanina Yu.E., Ishchenko A. V.[1], Irgashev R. A.[2], Weinstein I. A.[1]

[1)] NANOTECH Centre, Ural Federal University, Yekaterinburg, 620002, Russian Federation,

[2)] Postovsky Institute of Organic Synthesis, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, 620137, Russian Federation

The investigation of novel organic materials for the production of semiconductor devices is a topic of significant interest in the flexible electronics. The objective of this study is to determine the optical properties of benzothienoacene-based materials in dissolved, thin film, and powdered forms.

Исследование свойств новых органических полупроводниковых соединений представляет большой интерес в области проектирования различных оптоэлектронных устройств [1]. Соединения на основе тиофенов зарекомендовали себя как перспективный класс, поскольку могут обеспечивать обширную сопряженную систему за счет плоской молекулярной структуры, которая улучшают перенос зарядов в молекуле [2]. В данной работе представлены оптические свойства полупроводниковых органических материалов на основе бензо[b]тиено[2,3-d] тиофенов (BTT) с оксиметильными, метиламинной и бензольной функциональными группами (BTT-OCH3, BTT-OC2H5, BTT-2OCH2, B-BTT-2OCH2, BTT-N2CH3) в виде растворов, в тонкопленочных структур и в порошкообразном виде.

Оптические характеристики соединений определены методами абсорбционной оптической и фотолюминесцентной (ФЛ) спектроскопии. В спектрах оптического поглощения для образцов (BTT-OCH3, BTT-OC2H5, BTT-2OCH2) обнаружены несколько основных полос поглощения с максимумами около 250 и 325 нм, для других образцов BTT (B-BTT-2OCH2, BTT-N2CH3)

наблюдаются четыре полосы с максимумами вблизи 240, 260, 325 и 375 нм для раствора и тонкопленочной структуры. В порошкообразной форме наблюдается смещение в красную область и уширение полос.

Спектры ФЛ всех исследованных BTT представляют собой несимметричную полосу люминесценции с максимумом в диапазоне 410–510 нм, однако для двух соединений BTT-OCH3(405 нм и 460 нм) и B-BTT-2OCH2(445 нм и 515 нм) в порошкообразном виде наблюдаются две полосы люминесценции

В докладе приводятся данные о люминесцентных свойствах исследуемых веществ в растворе, в порошкообразном виде, а также в виде тонких пленок. Обсуждается влияние растворителя, структурных особенностей молекул и типа образцов на их оптические свойства.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Программы развития Уральского федерального университета имени первого Президента России Б.Н. Ельцина в соответствии с программой стратегического академического лидерства «Приоритет-2030».

1. Berggren, M., Nilsson, D. & Robinson, N. Organic materials for printed electronics, Nature Materials, 6, 3–5(2007).
2. Yongchul, L., Soomin, R., Eunjin, C., Dongil H., Taeshik E., Choongik, K., SungYong, S. Synthetic Metals, 282, 116944 (2021)

ВЛИЯНИЕ СПИНОВОГО СОСТОЯНИЯ ИОНОВ КОБАЛЬТА НА ПЕРЕХОД МЕТАЛЛ- ИЗОЛЯТОР В СЛОИСТЫХ КОБАЛЬТИТАХ

Уткин Н.А.[1], Солин Н.И.[1], Наумов С.В.[1]
[1)] Институт физики металлов им. М. Н. Михеева Уральского отделения РАН, 620108 Екатеринбург, Россия
E-mail: dimdim8283@gmail.com

EFFECT OF THE SPIN STATE OF COBALT IONS ON THE METAL-INSULATOR TRANSITION IN LAYERED COBALTITES

Utkin N.A.[1], Solin N.I.[1], Naumov S.V.[1]
[1)] M. N. Mikheev Institute of Metal Physics of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, 620108 Yekaterinburg, Russia

At a temperature of about 360 K, europium layered cobaltite makes a metal-insulator transition due to a change in the spin state of the ion of cobalt. The europium ion also contributes to the change in the spin state of cobalt ions, which must be taken into account.

Слоистые кобальтиты представляют большой научный интерес в области полупроводниковых материалов, поскольку обладают уникальными физическими свойствами [1]. Исследование свойств подобных материалов позволит понять природу различных явлений, например перехода металл-изолятор.

В качестве образца был рассмотрен слоистый кобальтит $EuBaCo_2O_{5.52}$, имеющий кристаллическую структуру перовскита. Поликристалл был синтезирован методом твердофазной реакции. Для определения электросопротивления была собрана экспериментальная установка. С помощью программируемых вольтметров и источника питания производилась управление магнитным полем и запись экспериментальных данных.

При температуре около 360 К обнаружен переход металл – изолятор, выражающийся изменением характера зависимости удельного электросопротивления от температуры.

Переход металл - изолятор объясняется изменением спинового состояния ионов Co^{3+} [1, 2]. В настоящее время считается, что переход металл – изолятор связан с переходом иона Co^{3+} в октаэдрах из HS - состояния в LS – состояние без изменения IS состояния в пирамидах.

Работа направлена на определение спинового состояния ионов кобальта при переходе металл - изолятор с учетом парамагнитного вклада иона европия из измерений магнитной восприимчивости.

1. Maignan A. et al. Structural and magnetic studies of ordered oxygen-deficient Perovskites LnBaCo2O5+ δ, closely related to the “112” structure . (Journal of Solid State Chemistry. – 1999. – Т. 142. – №. 2. – С. 247-260)

2. Frontera C. et al. Selective spin-state switch and metal-insulator transition in GdBaCo2O5.5 (Physical Review B. – 2002. – Т. 65. – №. 18. – С. 180405.)

УСИЛЕНИЕ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ УГЛЕРОДНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК ПРИ ПОМОЩИ ЯВЛЕНИЯ ПОВЕРХНОСТНОГО ПЛАЗМОННОГО РЕЗОНАНСА

Вагапов А. Ш.[1], Киряков А. Н.[1], Зацепин А. Ф.[1]
[1)] Уральский Федеральный Университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина
E-mail: alexander1705q@icloud.com

SURFACE PLASMON RESONANCE ENHANCED- LUMINESCENCE OF CARBON QUANTUM DOTS

Vagapov A. Sh.[1], Kiryakov A. N.[1], Zatsepin A. F.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

We simulated patterns of distribution of the electric field strength of silver nanoparticles at their different orientations. The optimal angle of particle rotation was selected to achieve the maximum value of the field strength above them, which will be used during further implantation.

Углеродные квантовые точки (УКТ) вызывают значительный интерес в виду их легкой функционализации и слабого фотообесцвечивания. Однако интенсивность их флуоресценции достаточно низка, что ограничивает их дальнейшее применение. Наночастицы драгоценных металлов широко используются для усиления люминесценции благодаря уникальному эффекту локализованного поверхностного плазмонного резонанса (ЛППР) [1, 2]. Металлы могут усиливать интенсивность излучения близких флуоресцентных молекул за счет усиленного электромагнитным полем возбуждения или передачи энергии. Это может стать эффективным решением проблемы низкой интенсивности флуоресценции УКТ. На свойства ЛППР влияет форма размер и диэлектрическое окружение таких частиц, наиболее предпочтительными с практической точки зрения являются частицы с острыми гранями или краями.

Синтез несферических металлических наночастиц возможен, в результате создания сильнонеравновесной среды за счет плотного потока ионов при ионной имплантации. Выбор радиационно-стойкой среды при этом обеспечивает малую мобильность имплантируемых ионов. Таким образом, в результате ионной имплантации можно достичь несферической формы в синтезируемых частицах [3].

В работе выполнено компьютерное моделирование картины напряженности электрического поля вокруг наночастиц серебра матрице SiO_2 в программе COMSOL Multiphysics 5.6. Моделирование проводилось исходя из данных, полученных в работе [3]. Оптические константы взяты из работы [4]

На рисунке 1а показана картина распределения напряженности электрического поля при повороте частиц на 30°, а на рисунке 1б показано изменение максимальной напряженности поля над частицами серебра при их вращении.

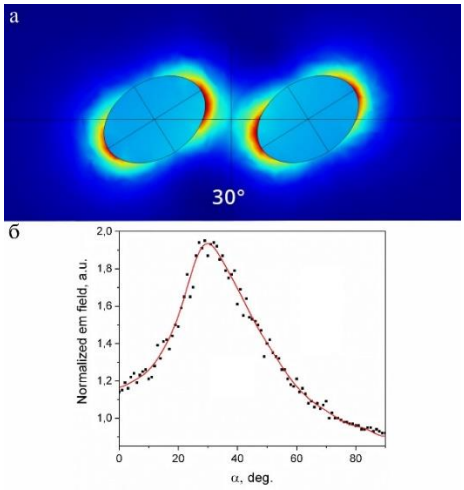


Рис. 1. (а) картина распределения напряженности электрического поля между частицами серебра, (б) зависимость максимального значения напряженности поля над частицами при их вращении

Максимальное значение напряженности электрического поля над частицами достигается при их повороте на 25-30° градусов. В соответствии с выводами из работы [3], можно синтезировать частицы под таким углом, что является перспективным с практической точки зрения. Следующим этапом работы является синтез наночастиц серебра и УКТ в матрице SiO_2, и исследование их взаимодействия.

Таким образом, показано, что наибольшее значение напряженности поля над частицами серебра возникает при их повороте на 25-30°, что будет учитываться в дальнейших исследованиях.

RFBR (grants № 20-42-660012)

1. Yuan K. et al. Effects of localized surface plasmon resonance of Ag nanoparticles on luminescence of carbon dots with blue, green and yellow emission //Applied Surface Science. – 2020. – T. 502. – C. 144277.
2. Bagra B. et al. Plasmon-enhanced fluorescence of carbon nanodots in gold nanoslit cavities //Langmuir. – 2019. – T. 35. – №. 27. – C. 8903-8909.
3. Kiryakov A. N. et al. Non-spherical plasmonic copper nanoparticles in a transparent MgAl2O4 ceramic matrix: Optical spectroscopy and conceptional models //Journal of Physics and Chemistry of Solids. – 2022. – T. 170. – C. 110966.
4. Johnson P. B. Optical constants of the noble metals / P. B. Johnson, R. W. Christy // Physical review B. – 1972. – V. 6. – №. 12. – P. 4370.

МЕТАМАГНЕТИЗМ КОЛЛЕКТИВИЗИРОВАННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ В МОДЕЛИ ХАББАРДА ДЛЯ ГЦК РЕШЕТКИ, ИНДУЦИРОВАННЫЙ ПЛАТО ВАН ХОВА

Василевский Ф.А.[1], Игошев П.А.[1, 2]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого президента России Б. Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
[2)] Институт физики металлов имени М. Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
E-mail: fedorvasilevski@gmail.com

METAMAGNETISM OF ITINETANT ELECTRONS IN THE HUBBARD MODEL FOR THE FCC LATTICE CAUSED BY THE VAN HOVE PLATEAU

Vasilevskiy F.A.[1], Igoshev P.A.[1, 2]
[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia B.N.Yeltsin
[2)] Institute of Metal Physics, Ural Branch of Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russia

Magnetic phase transitions in the Hubbard model for the lattice within nearest and next-nearest neighbor hopping approximation driven by a magnetic field change are investigated. It is shown that the proximity of Fermi level to van Hove plateau opens the possibility towards metamagnetic transition.

Ключевую роль для магнитных свойств твердых тел играют особенности плотности электронных состояний (ПЭС), которые, согласно теореме ван Хова имеют топологическую природу. В частности, в случае, когда эффективные массы в окрестности соответствующих точек обратного пространства велики, это может привести к огромной величине ПЭС или даже ее расходимости (сингулярности ван Хова). Эти особенности могут приводить также к возникновению необычным магнитным свойства, переходам первого рода, в частности метамагнетизму и т.д., а также структурным фазовым переходам в том случае, если они расположены вблизи уровня Ферми.

В работе рассмотрен фазовый переход первого рода из парамагнитного в ферромагнитное под действием магнитного поля H в модели Хаббарда в приближении среднего поля для плотности состояний ГЦК решетки в приближении ближайших и следующих за ближайшими соседями для $\tau = t/t'$ (t - интеграл переноса для ближайших соседей, t' - для следующих за ближайшими), имеющей особенность – плато ван Хова[3]. Гамильтониан модели Хаббарда имеет вид

$$H_{Hubbard} = \Sigma_{\sigma ij}\, t_{ij}\, a_{i\sigma}^{+}\, a_{j\sigma} - \Sigma_i\, h\, (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}) + U\, \Sigma_i\, n_{i\uparrow}\, n_{i\downarrow}$$

где U – параметр кулоновского взаимодействия, $h = \mu B * H$ – магнитное поле в

энергетических единицах, σ – проекция спина, a^+ и a – операторы рождения и уничтожения электрона на узле, $n = a^+a$ – оператор числа частиц. Здесь и ниже мы принимаем t = 1.

Для модельного исследования был выбран спектр с τ = - 0.52, что обеспечивает близость энергий двух точек ван Хова с противоположным типов седловых точек и большим значением эффективных масс (τ = - 0.5 соответствует гигантской, квазиодномерной сингулярности ван Хова). Эта пара точек приводит к так называемому плато ван Хова с достаточно большим значением ПЭС и обладающим значительной шириной, см. рис. 1.

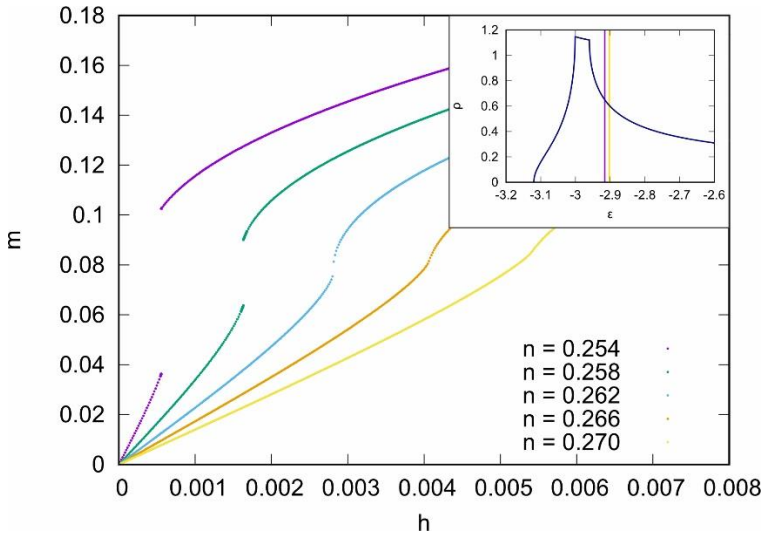


Рис. 1. Зависимость намагниченности от магнитного поля m(h), при U = 1.5, T = 0.0002 для различных значений концентрации электронов n и зависимость плотности состояний ρ(ε) для τ = - 0.52.

На данной зависимости видно, что кривая намагничивания имеет s-образный вид, характерный для метамагнетизма, в малых полях вещество является парамагнетиком (линейная зависимость), при определенном значении поля намагниченность меняется скачком, вещество становится ферромагнетиком. С уменьшением концентрации n скачок намагниченности становится больше, при увеличении n метамагнетизм исчезает. Таким образом наличие метамагнетизма напрямую связано с видом функции плотности состояний в области энергии Ферми, фазовый переход наблюдается в области, где функция Ферми выпукла вниз. При увеличении концентрации увеличивается значение плотности состояний на уровне Ферми, из-за чего стабилизируется ферромагнитное состояние. Исследована фазовая диаграмма ферромагнетик-парамагнетик, а также род перехода в зависимости от существенных параметров (U, n, T).

1. Мория Т. Спиновые флуктуации в магнетиках с коллективизированными электронами: Пер. с англ. – Мир, 1988.
2. Левитин Р. З., Маркосян А. С. Зонный метамагнетизм //Успехи физических наук. – 1988. – Т. 155. – №. 8. – С. 623-657.
3. Igoshev P. A., Irkhin V. Y. Giant density-of-states van hove singularities in the face-centered cubic lattice //Physics Letters A. – 2022. – Т. 438. – С. 128107.
4. Igoshev P. A., Katanin A. A. Ferromagnetic instability in itinerant fcc lattice electron systems with higher-order van Hove singularities: Functional renormalization group study, arXiv:2212.04135, принято в печать Physical Review B.

СРАВНИТЕЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МАГНИТНЫХ НАНОПРОВОЛОК В ТОНКОПЛЕНОЧНОМ СЛОЕ ОКСИДА АЛЮМИНИЯ ПОЛУЧЕННЫХ В РАЗНЫХ РЕЖИМАХ ЭЛЕКТРООСАЖДЕНИЯ

Верясова А.А.[1], Дрягина А.Е.[1], Горьковенко А.Н.[1], Кулеш Н.А.[1], Васьковский В.О.[1, 2]

[1)] Уральский федеральный университет имени первого президента России Б. Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

[2)] Институт физики металлов имени М. Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

E-mail: alenaver75@gmail.com

COMPARATIVE STUDY OF MAGNETIC NANOWIRES IN THIN ALUMINA FILMS SYNTHESISED BY DIFFERENT ELECTRODEPOSITION METHODS

Veryasova A.A.[1], Driagina A.E.[1], Gorkovenko A.N.[1], Kulesh N.A.[1], Vas'kovskiy V.O.[1, 2]

[1)] Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia

[2)] Institute of Metal Physics, Ural Branch of Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russia

This work considers magnetic properties and morphology of magnetic metallic nanowires in thin-film alumina matrix obtained by electrodeposition in alternating current and direct current modes. Magnetic hysteresis properties are studied and interpreted.

Магнитные нанопроволоки обладают уникальным набором свойств, обусловленных особенностями морфологии, и относятся к перспективному классу магнитных наноматериалов, представляющих интерес для целого ряда областей применения: среды для записи информации, сенсоры, устройства спинтроники, микроволновая техника и т.д. [1]. Сочетание протяженной формы с ферромагнитными свойствами открывает широкие возможности по использованию магнитных нанопроволок в качестве наполнителей для разнообразных полимеров и гелей. Одной из ключевых проблем практического применения нанопроволок является разработка универсальных методов изготовления и синтеза нанопроволок. В частности, интерес представляет получение массивов нанопроволок с использованием электроосаждения в режиме постоянного тока, что обеспечивает наилучший контроль их состава. В настоящей работе нами рассмотрены альтернативные пути создания массивов нанопроводов в тонкопленочном пористом слое с возможностью подведения электрических контактов с обеих торцевых поверхностей. В частности, рассмотрены различия в морфологии и магнитных свойствах нанопроводов, синтезированных в режимах постоянного и переменного тока.

В качестве основы для создания шаблонов выступали пленки Al либо Al/Ti, полученные методом ионного распыления толщиной 2 мкм [2]. Пленки были анодированы в растворе щавелевой кислоты, в результате чего был получен пористый шаблон. После получения пористых шаблонов в них путем электролитического осаждения был осажден магнитный материал. Для пленок Al осаждение происходило в режиме переменного тока (AC-режим), для пленок Al/Ti – в режиме переменного тока (DC-режим). Длина полученных нанопроволок составила около 1,5 мкм, диаметр – около 60 нм.

Структурные свойства образцов исследовались на электронном микроскопе Tescan Mira3 LMU. Для аттестации магнитных свойств были проведены измерения на вибрационном магнитометре Lake Shore. Измерение проводились в двух направлениях: параллельно и перпендикулярно оси массива нанопроволок.

В качестве примера на рисунке продемонстрированы петли гистерезиса для образцов, полученных электроосаждением в различных режимах. Полученные в обоих режимах нанопроволоки обладают выраженной магнитной одноосной анизотропией в направлении, параллельному оси массива нанопроволок. Нанопроволоки, полученные в AC-режиме имеют более высокую коэрцитивную силу и ярко выраженную анизотропию.

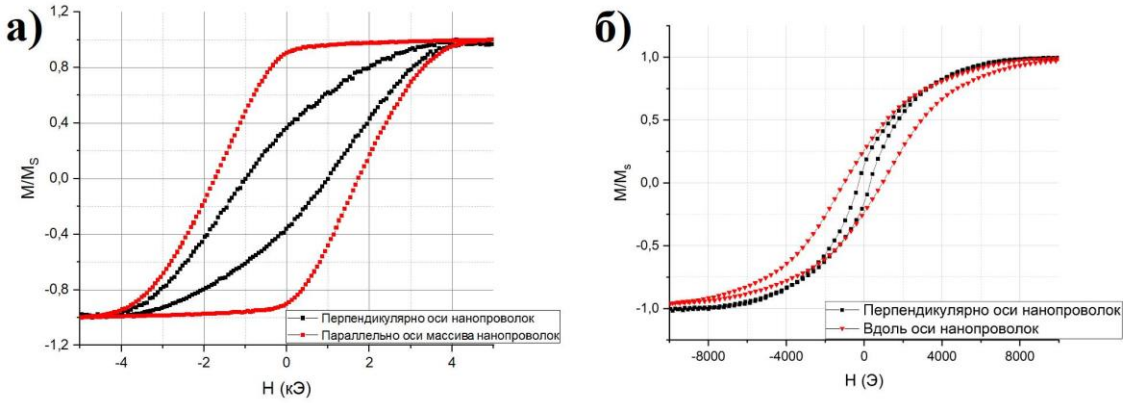


Рис. 1. Петли гистерезиса, измеренных в направлении вдоль (красная линия и точки) или перпендикулярно (черная линия и точки) оси нанопроволок Co, полученных с использованием электроосаждения в AC-режиме (а) и DC-режиме (б).

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования РФ, тема НИР FEUZ 2023-0020.

1. Fernández-Roldán J. A. Micromagnetism of cylindrical nanowires with compositional and geometric modulations. – 2019.
2. Driagina A. et al. Synthesis and magnetic properties of Co nanowires/PVDF composites //IEEE Magnetics Letters. – 2021.

ИНЖЕКЦИЯ ЧИСТО СПИНОВОГО ТОКА В ГЕЛИМАГНЕТИК

Ясюлевич И.А.[1], Бебенин Н.Г.[1], Устинов В.В.[1]
[1)] Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
E-mail: yasyulevich@imp.uran.ru

INJECTION OF PURE SPIN CURRENT INTO HELIMAGNET

Yasyulevich I.A.[1], Bebenin N.G.[1], Ustinov V.V.[1]
[1)] Institute of Metal Physics, Ekaterinburg, Russian Federation

We theoretically study the injection of a pure spin current into a metallic helimagnet. It is shown that there are two characteristic decay lengths of the spin current in a helimagnet. The change in the polarization of the spin current upon its injection into a helimagnet is described.

Гелимагнетики – это особый вид антиферромагнетиков, характеризующихся спиральной магнитной структурой. В настоящей работе теоретически изучена инжекция чисто спинового тока в металлический гелимагнетик [1]. Предполагается, что в металле спиральная структура образована локализованными моментами, с которыми взаимодействуют электроны проводимости. Для описания эволюции намагниченности электронов проводимости при распространении спинового тока от границы вглубь металла использовано уравнение типа Блоха-Торри. Показано, что в гелимагнетике имеются две характерные длины затухания спинового тока. Первая является аналогом длины спиновой диффузии в нормальном металле. Эта длина характеризует масштаб спадания неравновесной намагниченности электронов проводимости, сонаправленной с намагниченностью локализованных электронов. В гелимагнетиках эта характерная длина всегда меньше длины спиновой диффузии, причём уменьшение определяется отношением периода спирали гелимагнетика к длине спиновой диффузии. Вторая характерная длина определяет масштаб спадания компоненты неравновесной намагниченности электронов проводимости, направленной перпендикулярно намагниченности локализованных электронов. Показано, что если на электроны проводимости действует достаточно сильное обменное поле со стороны локализованных электронов, а время спиновой релаксации электронов проводимости велико, то в короткопериодных гелимагнетиках обе указанные длины затухания значительно меньше длины спиновой диффузии. Такие гелимагнетики могут применяться в спиновых устройствах в качестве эффективных экранов спиновых токов – материалов используемых в спинтронике в качестве аналогов изоляторов электрического тока. Предсказан эффект хиральной поляризации чисто спинового тока – возникновение продольно-поляризованного (относительно оси

спирали гелимагнетика) спинового тока при инжекции поперечно-поляризованного чисто спинового тока.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта № 22-22-00220.

1. Ясюлевич И.А., Бебенин Н.Г., Устинов В.В., ЖЭТФ, 163, 1 (2023).

КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ В ОБРАЗЦАХ ТОНКИХ ПЛЕНОК Sb_2Te ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ЗНАЧЕНИЯХ ВРЕМЕНИ И ТЕМПЕРАТУРЫ ОТЖИГА

Юшков А. А.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: yushkov.anton@urfu.ru

CRYSTALLIZATION IN SAMPLES OF Sb_2Te THIN FILMS AT DIFFERENT ANNEALING TIMES AND TEMPERATURES

Yushkov A. A.[1]
[1)] Ural Federal University

Thin Sb_2Te films with a thickness gradient were studied via transmission electron microscopy (TEM). The processes of forced crystallization were examined with thermal annealing.

Теллурид сурьмы рассматривается и как перспективный материал для изготовления постоянной памяти на эффекте фазового перехода [1]. В отличие от других фазопереходных материалов, он характеризуется высокой скоростью кристаллизации и температурной стабильностью. Так же исследуются свойства Sb_2Te в качестве топологического изолятора, термоэлектрика, и высокотемпературного сверхпроводника. В контексте данных применений представляет интерес исследовать процессы кристаллизации аморфных пленок Sb_2Te при воздействии температуры. Авторы [2] указывают на рост нуклеации (появление множества центров кристаллизации в аморфной матрице) в халькогенидных пленках на основе Sb_2Te с уменьшением толщины (в экспериментах с кристаллизацией при одновременном нагреве и воздействии пучка ПЭМ), и называют этот эффект парадоксальным.

Теллурид сурьмы рассматривается и как перспективный материал для изготовления постоянной памяти на эффекте фазового перехода [1]. В отличие от других фазопереходных материалов, он характеризуется высокой скоростью кристаллизации и температурной стабильностью. Так же исследуются свойства Sb_2Te в качестве топологического изолятора, термоэлектрика, и высокотемпературного сверхпроводника. В контексте данных применений представляет интерес исследовать процессы кристаллизации аморфных пленок Sb_2Te при воздействии температуры. Авторы [2] указывают на рост нуклеации (появление множества центров кристаллизации в аморфной матрице) в халькогенидных пленках на основе Sb_2Te с уменьшением толщины (в экспериментах с кристаллизацией при одновременном нагреве и воздействии пучка ПЭМ), и называют этот эффект парадоксальным.

Нами были исследованы методами ПЭМ образцы пленок Sb_2Te, полученных методом магнетронного напыления, и подвергнутых вакуумному отжигу: при 200°C в течение 48с (в данном случае формировались кристаллы наименьших линейных размеров ~ 1мкм и с внутренним изгибом до 110 град/мкм); при 145°C в течение 48с (~2мкм, 120 град/мкм); при 120°C в течение 90 минут (>2мкм, 140 град/мкм). Таким образом, можем выделить тенденцию большего изгиба решетки при меньших температурах отжига, рост более крупных кристаллов в пленке, а также большее влияние температуры, а не времени отжига.

Работа выполнена при частичной поддержке темы госзадания FEUZ 2023-0020.

1. Hu, J., Lin, C. et al. Cr-doped Sb2Te materials promising for high performance phase-change random access memory. J. Alloys Compd. 2022; 908: 164593. DOI: 10.1016/j.jallcom.2022.164593
2. Kooi, B. J. and De Hosson, Th. M. On the crystallization of thin films composed of Sb3.6Te with Ge for rewritable data storage. J. Appl. Phys. 2004; 95(9): 4714-4721. DOI: 10.1063/1.1690112

РАСЧЕТ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ И ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОВЕРХНОСТИ ЦИНКОСОДЕРЖАЩИХ ЧАСТИЦ В ПЛЕНКАХ ДИОКСИДА КРЕМНИЯ

Забокрицкая Е.С.[1], Бунтов Е.А.[1], Кащенко Н.М.[1], Зацепин А.Ф[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: Zabokritskaya_e@mail.ru

CALCULATION OF THE ENERGY STRUCTURE AND OPTICAL PROPERTIES OF THE SURFACE OF ZINC-CONTAINING PARTICLES IN SILICON DIOXIDE FILMS

Zabokritskaya E.S.[1], Buntov E.A.[1], Kashchenko N.M.[1], Zatsepin A.F.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The aim of this work is to study the optical properties of the nanoparticle-matrix interface for SiO_2 implanted with zinc ions. The structural models of the interfaces silica-Zn, silica-ZnO and silica-willemite are selected and their geometric optimization is carried out.

В настоящее время кремний является одним из базовых для электроники материалов. Диоксид кремния, являющийся широкозонным прозрачным изолятором, находит множество применений как в кристаллической, так и в аморфной фазах. Внедрение металлических и полупроводниковых частиц в основную матрицу диоксида кремния — это эффективный метод изменения его электронной структуры и физических свойств, в ходе которого, в частности, происходит внедрение центров свечения в матрицу оксида [1].

Система SiO_2:Zn, полученная путем имплантации ионов Zn в диоксид кремния с последующим отжигом, может содержать различные цинкосодержащие фазы, включая металлический цинк, ZnO или Zn_2SiO_4. Определение типа нановключений в имплантированные и отожженные матрицы SiO_2 требует сочетания экспериментальных методов оптической спектроскопии и методов ab initio моделирования.

Целью данной работы является теоретическое исследование оптических свойств интерфейса наночастица-матрица для SiO_2, имплантированного ионами цинка. В ходе работы выбраны структурные модели интерфейсов SiO_2:Zn, SiO_2:ZnO и SiO_2:Zn_2SiO_4 (см. Рис. 1), для которых было проведено моделирование оптических свойств методом DFT.

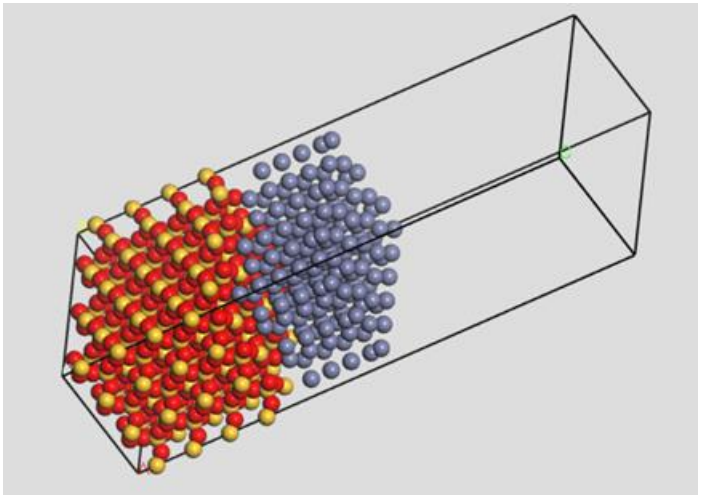


Рис. 1. Пример структуры интерфейса наночастица цинка - матрица SiO_2

Сравнение полученных в ходе моделирования результатов с показателями реальных образцов показало, что модельный спектр оптического отражения структуры SiO_2:ZnO в целом соответствует среднему уровню отражения из литературных источников [2]. Таким образом, результаты численных экспериментов в сочетании с экспериментальными спектрами могут быть использованы для идентификации цинк-содержащих фаз в составе имплантированной системы SiO_2:Zn.

1. Zatsepin D.A., Zatsepin A.F., Boukhvalov D.W. Electronic structure and photoluminescence properties of Zn-ion implanted silica glass before and after thermal annealing, Journal of Non-Crystalline Solids 432, 2016, pp. 183-188.
2. Huaming Yang, Yu Xiao, Kun Liu, Qiming Feng Chemical Precipitation Synthesis and Optical Properties of ZnO/SiO2 Nanocomposites // Journal of the American Ceramic Society 91(5):1591 – 1596, May 2008.

АНАЛИЗ БЛИЖНЕГО ПОРЯДКА В $LiGe_2(PO_4)_3$ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ФУНКЦИЙ ПАРНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

Зыков К.Ю.[1], Балякин И.А.[1, 2], Першина С.В.[3], Власов М.И.[3], Ремпель А.А[2]
[1)] Уральский Федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
[2)] Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук, Екатеринбург, Россия
[3)] Институт высокотемпературной электрохимии Уральского отделения Российской академии наук, Екатеринбург, Россия
E-mail: kirzykofff@gmail.com

ANALYSIS OF SHORT-RANGE ORDER OF $LiGe_2(PO_4)_3$ USING PAIR DISTRIBUTION FUNCTIONS

Zykov K.Y.[1], Balyakin I.A.[1, 2], Pershina S.V.[3], Vlasov M.I.[3], Rempel A.A.[2]
[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia B. N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia
[2)] Institute of Metallurgy of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia
[3)] Institute of High Temperature Electrochemistry of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia

In this work, the short-range order of $LiGe_2(PO_4)_3$ was studied experimentally and theoretically. For $LiGe_2(PO_4)_3$ system, pair distribution functions and volume coefficient of Li-ion diffusion were calculated. Then it was compared with experimental data.

В настоящий момент традиционные литий-ионные аккумуляторы, которые являются одним из наиболее распространенных источников питания, уже не обеспечивают все непрерывно возрастающие потребности современных технологий в электроэнергии [1]. Кроме того, так как они содержат электролит из жидкого или полимерного материала, возникают проблемы с безопасностью и стабильностью устройств на их основе [1]. Для решения этих проблем предлагается разработка аккумуляторов с твердым электролитом, и одним из перспективных материалов для этой цели является $LiGe_2(PO_4)_3$. Однако проблемой таких материалов, в том числе и $LiGe_2(PO_4)_3$, является более низкая относительно традиционных электролитов литий-ионная проводимость, которая во многом зависит от особенностей его кристаллической структуры. При этом влияние структуры дальнего порядка на диффузию ионов лития достаточно хорошо изучено, а работы, посвященные изучению структуры ближнего порядка, практически отсутствуют. В этой связи данная работа направлена на анализ ближнего порядка материала на основе $LiGe_2(PO_4)_3$ с использованием функций парного распределения.

Методом полного рентгеновского рассеяния были получены функции парного распределения для $LiGe_2(PO_4)_3$ в кристаллическом и стеклообразном состояниях, которые синтезированы по технологии, подробно описанной в работе [2]. С помощью процедуры активного машинного обучения, реализованного в программном пакете DP-GEN, для системы $LiGe_2(PO_4)_3$ была сгенерирована DeePMD-модель – многочастичный потенциал взаимодействия в виде набора искусственных нейронных сетей. DeePMD-потенциал обучался на базе данных, полученных в ходе ab initio расчетов в программном пакете VASP. Потенциал обученной модели позволяет хорошо воспроизводить ab initio энергии (точность порядка единиц мэВ) и ab initio силы (точность порядка десятых эВ/Å), а также рассчитывать структурные и динамические характеристики с высокой точностью. В результате, для системы $LiGe_2(PO_4)_3$ были рассчитаны функции парного распределения и объёмный коэффициент диффузии ионов лития. Рассчитанные величины сравнены с экспериментальными.

Расчеты были выполнены с использованием суперкомпьютера «Уран» ИММ УрО РАН.

1. Kuo, P. H., Du, J. / Lithium Ion Diffusion Mechanism and Associated Defect Behaviors in Crystalline $Li_{1+x}Al_xGe_{2-x}(PO_4)_3$ Solid State Electrolytes // The Journal of Physical Chemistry C. 2019. doi: 10.1021/acs.jpcc.9b08390
2. Pershina S.V., Antonov B.D., Farlenkov A.S., Vovkotrub E.G. / Glass-ceramics in $Li_{1+x}Al_xGe_{2-x}(PO_4)_3$ system: the effect of Al2O3 addition on microstructure, structure and electrical properties // J. Alloys and Compounds. 2020. V. 835. № 155281. doi: 10.1016/j.jallcom.2020.155281

СЕКЦИЯ 3

ПРИБОРОСТРОЕНИЕ И РОБОТОТЕХНИКА

РАЗРАБОТКА АВТОМАТИЗИРОВАННОЙ СИСТЕМЫ УПРАВЛЕНИЯ ПРОЦЕССОМ ОТБЕЛКИ МАСЛА В ПО SIEMENS SIMATIC STEP 7

Айсин А.М.[1, 2], Вохминцев А.С.[1], Авдеев Н.О.[2]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
[2)] АО «Жировой комбинат», Екатеринбург, Россия
E-mail: aldiyar.aisin@mail.ru

DEVELOPMENT OF AN AUTOMATED CONTROL SYSTEM FOR THE OIL BLEACHING PROCESS IN SIEMENS SIMATIC STEP 7 SOFTWARE

Aisin A.M.[1, 2], Vokhmintsev A.S.[1], Avdeev N.O.[2]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia
[2)] «Fats and oil integrated works» JSC

Comprehensive use of computer technology in the automation of production allows for the creation of flexible automated production. Their creation is the main direction of development and automation of production processes.

На сегодняшний день автоматизированные системы управления играют большую роль в современном мире. Разработка таких систем позволяет оптимизировать работу и тем самым повысить производительность труда, осуществляя контроль за всеми основными видами деятельности. Так как нельзя полностью исключить из процесса человека, то необходимо создать для него оптимальные условия эффективной реализации диспетчерского управления. Таким образом, появляется ориентация на оператора/диспетчера и его задачи. Для решения данного вопроса применяются SCADA-системы, применение которых позволяет достичь высокого уровня автоматизации в решении необходимых задач. Цель данной работы заключалась в автоматизации системы управления технологическим процессом отбелки масла с созданием SCADA-системы в АО «Жировой комбинат».

Для ее реализации использовалось программное обеспечение Siemens SIMATIC STEP7, с помощью которого были написана программа [1-2]. Данная программа состоит из двух частей: инициализация дискретных и аналоговых входов/выходов; процесс автоматического управления комплексом процедур, проводимых для отбелки масла. Для правильной работы дискретных и аналоговых входов/выходов создавались отдельные функциональные блоки, в которых производилась настройка путем присваивания каждому биту определенной команды. Также каждый бит адресовался на определенный блок данных, в котором хранились все необходимые переменные. Программа для автоматического управления процессом отбелки состояла из отдельных подпрограмм, алгоритм которых, приведен на рисунке 1а [1,3].

Как видно из рисунка 1а, на начальном этапе идет выбор типа управления, для того чтобы оператор мог корректировать процесс. При выборе автоматического типа управления программа начинает по очереди запускать определенные технические процессы или же находится в режиме ожидания до выполнения определенных условий. При выборе ручного управления у оператора появляется возможность выбирать необходимый процесс и корректировать его работу с помощью подпрограммы «Выбор шага», позволяющей переключаться между процессами.

Для упрощения разработки программной составляющей также разрабатывается SCADA-система. Ее применение – это осуществлять в реальном времени контроль и управление технологическим процессом, а также получать и обрабатывать информацию о процессе в удобном виде. Система получает информацию с контроллеров, которые в свою очередь принимают информацию с различных датчиков. Для разработки данной системы использовался программный пакет Wonderware InTouch. Изображение SCADA-системы на экране пульта оператора приведена на рисунке 1б [4].

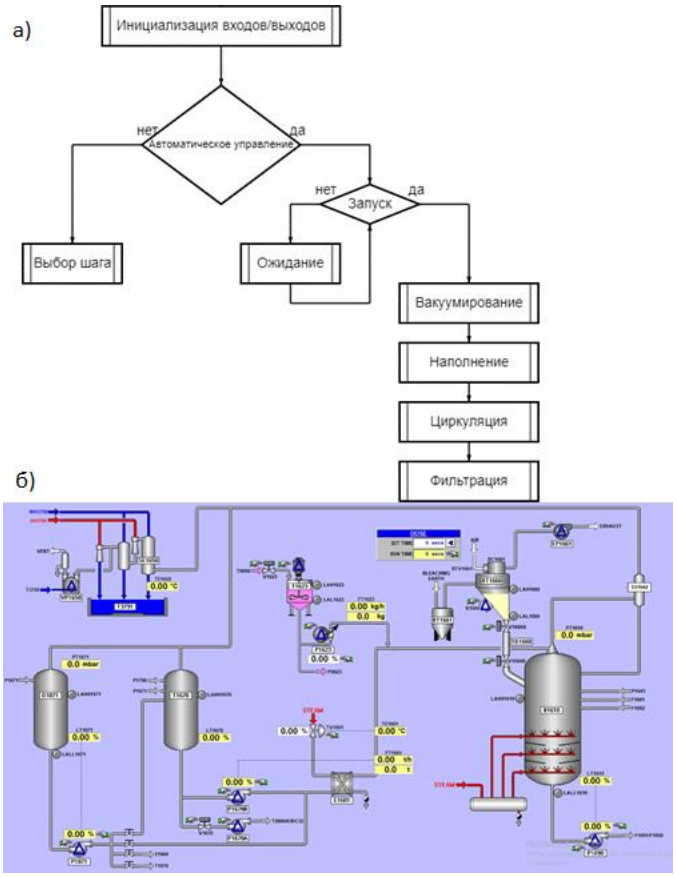


Рис. 1. а - алгоритм программы управления процессом; б - отображение на экране оператора

В ходе работы была частично автоматизирована и протестирована система управления технологическим процессом отбелки масла в АО «Жировой комбинат».

1. Normanyo E., Husinu F., Agyare O. R. Developing a human machine interface (HMI) for industrial automated systems using siemens simatic WinCC flexible advanced software //Journal of Emerging Trends in Computing and Information Sciences. – 2014. – Т. 5. – №. 2. – С. 134-144.
2. Beresford D. Exploiting siemens simatic s7 plcs //Black Hat USA. – 2011. – Т. 16. – №. 2. – С. 723-733.
3. Chan J. C. et al. Design, Fabrication, and Testing of a PLC Training Module Using Siemens S7-300 PLC //DLSU Engineering e-Journal. – 2007. – Т. 1. – №. 1. – С. 43-54.
4. Thepmanee T. et al. Implementation of control and SCADA system: Case study of Allen Bradley PLC by using WirelessHART to temperature control and device diagnostic //Energy Reports. – 2022. – Т. 8. – С. 934-941.

ТЕНЗОМОДУЛЬ ДАТЧИКА ДАВЛЕНИЯ С ПОВЫШЕННОЙ МЕХАНИЧЕСКОЙ ПРОЧНОСТЬЮ И ВСТРОЕННЫМ ДАТЧИКОМ ТЕМПЕРАТУРЫ

Басов М.В.[1]
[1)] Федеральное Государственное Унитарное Предприятие «Всероссийский Научно-Исследовательский Институт Автоматики им. Н.Л. Духова», г. Москва, Россия
E-mail: engineerbasovm@gmail.com

PRESSURE SENSOR WITH INCREASED MECHANICAL STENGHT AND TEMPERATURE SENSOR

Basov M.V.[1]
[1)] Dukhov Automatics Research Institute, Moscow, Russia

A pressure sensor with improved characteristics is presented. A temperature sensor has been developed in the form of a Schottky diode and located in a single package with pressure sensor. The assembly structure of pressure sensor uses mechanical stops to increase the mechanical strength.

Разработан тензомодуль датчика давления (ДД), в состав которого входят одновременно два преобразователя физических величин (рис. 1). Основным элементом тензомодуля ДД является кремниевый преобразователь давления (ПД) в виде микроэлектромеханической системы, функционирующей на основе тензорезистивного эффекта. Одним из преимуществ разработки является увеличение момента давления-разрушения ПД за счет использования защитного механизма в сборочной конструкции ПД. В работе рассматриваются 3 вида тензомодулей ДД для различных диапазонов дифференциального и избыточного давления до 25, 60 и 160 кПа. Вторым элементом в составе тензомодулей ДД является кремниевый преобразователь температуры (ПТ) необходимый, как для непосредственного измерения температуры внутри объема корпуса тензомодуля ДД, так и для прецизионной корреляции температурных коэффициентов нулевого сигнала и чувствительности для ПД с помощью внешней схемы обработки сигнала ДД.

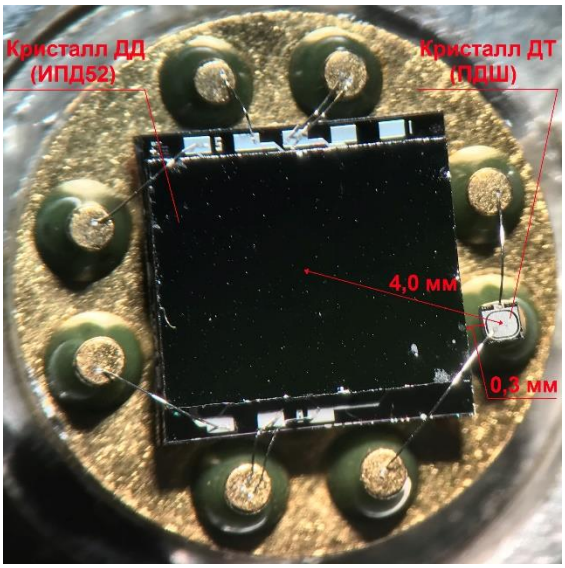


Рис. 1. Тензомодуль ДД с повышенной механической прочностью и встроенным ПТ (вид сверху).

ПТ имеет объем равный 0,8x0,8x0,4 мм^3, что позволяет располагать элемент непосредственно вблизи от ПД (менее 1,5 мм между гранями ПД и ПТ). ПТ представлен в виде планарного диода Шоттки (ПДШ). ПТ на основе барьера Шоттки позволяет осуществлять меньшее энергопотребление для внешней схемы обработки сигнала ДД в отличии от классических используемых структур ПТ на основе p-n перехода. Прямое падение напряжения ПДШ составляет $U_{пр.ПДШ}$ = 0,18…0,22 мВ при $I_{пр.ПДШ}$ = 1,0 мА (или, соответственно, $W_{ПДШ}$ = 0,18…0,22 мВт), высокий температурный коэффициент $ТК_{ПДШ}$ = -1,60…-1,68 мВ/ºС (погрешность dТК < 0,7 %) для диапазона Т = -65…+115 ºС и высокое пробивное напряжение на обратной ветви вольт-амперных характеристик $U_{проб.ПДШ}$ > 85 В (к примеру, $I_{ут}$ < 10 мкА при $U_{обр}$ = 40 В) [1,2]. Проведены исследования о разнице работ между аналогами ПД, расположенными удаленно на внешней схеме обработки сигнала ДД, ПТ в виде ПДШ и ПД в окончательной сборке ДД.

Для увеличения показателей момента давления-разрушения ДД при воздействии перегрузочного давления в сборочной конструкции ПД были использованы дополнительные элементы в виде механических упоров с двух сторон от ПД [3-5]. Свободный изгиб мембраны ПД до соприкосновения с упорами происходит при подаче номинальных диапазонов давления с любой из двух сторон от элемента благодаря корректному сочетанию конструкторско-технологических особенностей построения сборочной конструкции ПД. Использование данной конструкции позволяет увеличить границу момента для давления-разрушения от 3 до 5 раз в зависимости от модификации тензомодулей ДД за счет фиксации критического изгиба мембраны на упоре.

В настоящий момент усовершенствованные модификации тензомодулей ДД проходят предварительные испытания в составе полной сборки ДД, по

результатам которых будет оценена потенциальная возможность серийного производства данного продукта в ФГУП «ВНИИА»

Исследования проведены при поддержке ФГУП «Всероссийский Научно-Исследовательский Институт Автоматики им. Н.Л. Духова».

1. G. Perez, G. Chicot, Y. Avenas, P. Lefranc, P.-O. Jeannin, D. Eon, N. Rouger, “Integrated temperature sensor with diamond Schottky diodes using a thermosensitive parameter”, Diamond and Related Materials, Vol. 78 (2017) pp. 83-87.
2. M. Basov, “Schottky diode temperature sensor for pressure sensor,” Sensors and Actuators A: Physical, vol. 331, 112930, 2021.
3. M. Basov and D. Prigodskiy, “Investigation of High Sensitivity Piezoresistive Pressure Sensors at Ultra-Low Differential Pressures,” Sensors Journal, vol. 20, pp. 7646-7652, 2020.
4. N. Xu, D. Lu, L. Zhao, Z. Jiang, H. Wang, X. Guo, Z. Li, X. Zhou, and Y. Zhao, “Application and Optimization of Stiffness Abruption Structures for Pressure Sensors with High Sensitivity and Anti-Overload Ability,” Sensors, vol. 17, 1965, 2016.
5. M. Basov and D. Prigodskiy, “Development of High-Sensitivity Piezoresistive Pressure Sensors for -0.5…+0.5 kPa,” Journal of Micromechanics and Microengineering, vol. 30, 105006, 2020.

ОПТИМАЛЬНОЕ УПРАВЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОМЕХАНИЧЕСКОЙ СИСТЕМОЙ ДВУХЗВЕННОГО МАНИПУЛЯТОРА

Чупин И.А.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
E-mail: mr.tchupin@yandex.ru

OPTIMAL CONTROL OF THE ELECTROMECHANICAL SYSTEM OF THE TWO-LINK MANIPULATOR

Chupin I.A.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg,Russia

The problem of optimal control of the electromechanical system of two-link robot is considered. The system is described by the equations of mechanical and electromagnetic dynamics. The decomposition and the maximum principles are used. Formulas for calculating control switching moments are obtained.

Рассматривается задача построения оптимального управления электромеханической системы управления движением двухзвенного манипулятора. Манипулятор состоит из двух абсолютно твердых тел, соединенных идеальным цилиндрическим шарниром. Первое тело при помощи шарнира связано с неподвижным основанием. На конце второго тела укреплен схват для перемещения груза. Описанная механическая система совершает плоскопараллельное движение. Манипулятор управляется при помощи двух независимых приводов, расположенных в шарнирах. Приводы моделируются электродвигателями постоянного тока с независимыми возбуждениями. Рассматриваемая электромеханическая система описывается уравнением динамики механической части системы и уравнениями электромагнитной части системы. Для решения поставленной нелинейной задачи оптимального управления используется принцип декомпозиции, что позволяет упростить задачу и использовать принцип максимума для нахождения оптимального управления. В качестве критерия оптимальности рассмотрена задача быстродействия. Полученное оптимального управление обеспечивает перемещение из начального положения покоя в конечное положение покоя. Получены формулы для вычисления моментов переключения оптимального управления. Результаты подтверждаются численными экспериментами.

1. Chernousko F.L., Bolotnik N.N., Gradetsky V.G., Manipulation Robots: Dynamics, Control and Optimization, Boca Raton: CRC Press, (1994).
2. Avetisyan, V.V., Optimal control of the electromechanical system according to the combined criterion, Mechanics - Proceedings of National Academy of Sciences of Armenia, 71, 5-16,(2018)

РАЗРАБОТКА ВИРТУАЛЬНОГО ПРИБОРА ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ МЕМРИСТИВНЫХ СТРУКТУР В ИМПУЛЬСНОМ РЕЖИМЕ

Федоров Д.Д.[1], Петренёв И.А.[1], Вохминцев А.С.[1], Вайнштейн И.А.[1, 2]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Институт металлургии УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: d.d.fedorov@urfu.ru

VIRTUAL INSTRUMENT DEVELOPMENT FOR STUDYING MEMRISTIVE STRUCTURES IN THE PULSE MODE

Fedorov D.D.[1], Petrenyov I.A.[1], Vokhmintsev A.S.[1], Weinstein I.A.[1, 2]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia
[2)] Institute of Metallurgy of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia

A virtual instrument for registration of resistive switching for memristive structure based on titanium dioxide was developed and tested. It was possible to adjust the exact series of pulses with a duration of 100 μs. As a result, a consistent change in the resistance of the memristor was obtained.

В настоящее время активно изучаются мемристивные структуры ввиду множества их потенциальных применений в качестве, например, ячеек энергонезависимой памяти [1], логических элементов [2] или синапсов в искусственных нейронных сетях [3]. В этой связи возникает необходимость в проектировании и использовании автоматизированных системах сбора и обработки большого массива данных при исследовании эффектов резистивного переключения в создаваемых мемристивных структурах [4]. Поэтому цель данной работы заключается в разработке и апробации виртуального прибора (ВП) в среде LabVIEW для автоматизации процессов исследования мемристивных структур при многократном импульсном воздействии.

Виртуальный прибор выполнен на базе измерительного комплекса, который включает в себя микрозондовую станцию Cascade Microtech MPS 150 и модульные приборы производства «National Instruments»: генератор и измеритель тока и напряжения (SMU) PXIe-4143, а также программируемый осциллограф PXI-5124.

Блок-схема работы разработанного ВП «Pulse Switching» приведена на рис. 1. Блок инициализации активирует используемые модульные приборы. Блок входных данных управляется оператором – вводятся величины амплитуд импульсов записи и чтения, длительность импульсов, а также ограничение по току (от 10 мкА до 150 мА). После ввода входных данных активируется блок генерации последовательности импульсов, состоящей из импульсов записи и импульсов чтения. Сгенерированная последовательность подается на

исследуемый образец. С помощью осциллографа производится измерение падения напряжения на структуре, а сила тока измеряется непосредственно источником сигнала. Далее измеренные значения величин тока I и напряжения U попадают в блок обработки данных, где на их основе вычисляются значения сопротивления R и проводимости G для каждого цикла работы. Полученные величины выводятся на лицевую панель в удобном для пользователя виде и записываются в текстовый файл в блоке записи данных. Таким образом, результатом работы ВП «Pulse Switching» является набор данных, характеризующий изменение проводимости исследуемой структуры с каждым последующим циклом.

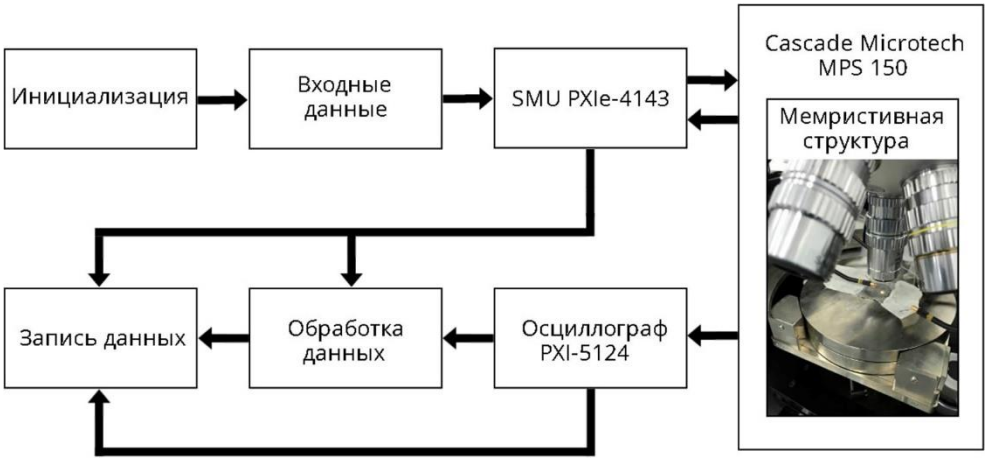


Рис. 1. Блок-схема измерительного комплекса по исследованию мемристивных структур

Проведена апробация разработанного ВП на исследованной ранее мемристорной сэндвич-структуре на основе массива нанотубулярного TiO_2 толщиной 200 нм [5]. Подобраны оптимальные параметры воздействующего сигнала для контролируемого изменения сопротивления образца импульсами записи и высокоточного измерения параметров структуры импульсами чтения. Так, при подаче 1000 одинаковых импульсов записи амплитудой 1 В и длительностью 200 мкс зафиксировано последовательное уменьшение сопротивления от 100 до 50 Ом.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Программы развития Уральского федерального университета имени первого Президента России Б.Н. Ельцина в соответствии с программой стратегического академического лидерства "Приоритет-2030".

1. A.S. Vokhmintsev, I.A. Petrenyov, R.V. Kamalov, I.A. Weinstein, Nanotechnology, 33, 075208 (2022).
2. T. Ibrayev, I. Fedorova, A. Maan, A. James, Circuits and Systems, 5, 265 (2014).

3. E. Covi, S. Brivio, A. Serb, T. Prodromakis, M. Fanciulli, S. Spiga, Frontiers in Neuroscience, 10, 482 (2016).
4. A.O. Gryaznov, I.B. Dorosheva, A.S. Vokhmintsev, R.V. Kamalov, I.A. Weinstein, Proceedings of 2016 SIBCON, 1 (2016).
5. I.B. Dorosheva, A.S. Vokhmintsev, R.V. Kamalov, A.O. Gryaznov, I.A. Weinstein, Proceedings of 2018 USBEREIT, 279 (2018).

РАЗРАБОТКА АППАРАТНО-ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ ВЕЩЕСТВ ПРИ ОХЛАЖДЕНИИ

Гашимова В.Р.[1], Тестов Д.С[1], Моржухина С.В.[1], Моржухин А.М.[1]
[1)] Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Университет "Дубна", Дубна, Россия
E-mail: lera.gashimova@yandex.ru

DEVELOPMENT OF A HARDWARE-SOFTWARE COMPLEX FOR STUDYING PHASE TRANSITIONS OF SUBSTANCES DURING THE COOLING

Gashimova V.R.[1], Testov D.S.[1], Morzhukhina S.V[1], Morzhukhin A.M.[1]
[1)] "Dubna State University", Dubna, Russia

The work is devoted to the development of a hardware-software complex for studying the phase transitions of substances during cooling and calculating the main physical and chemical characteristics of substances.

Изучение физико-химических свойств теплоаккумулирующих материалов на основе кристаллогидратов является перспективным направлением исследований, что было показано в ряде работ [1-3]. Метод температурной истории позволяет исследовать физико-химические свойства веществ с фазовым переходом при естественном охлаждении в массе до 30 г, в отличии от метода дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК). Но в связи с необходимостью проведения большого числа экспериментальных исследований данным методом в режиме термоциклирования выполнение расчетов многих параметров в ручном режиме стало практически невозможным.

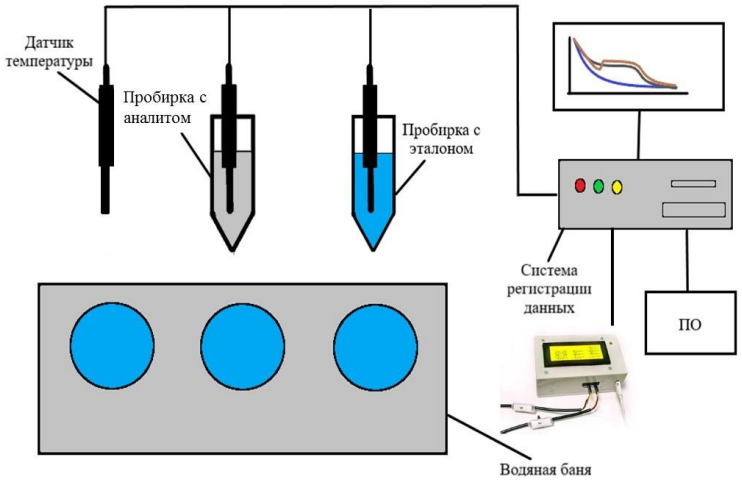


Рис. 1. Общая схема аппаратно-программного комплекса ТИ

Для автоматизации процесса обработки экспериментальных данных был разработан аппаратно-программный комплекс, позволяющий измерять изменение температуры во времени в режимах нагрева и охлаждения (АПК ТИ). АПК ТИ позволяет и рассчитать ряд некоторых физико-химических характеристик: переохлаждение Δt, °C, коэффициент теплопередачи h, Вт/(м^2·K), удельную теплоемкость в твердой и жидкой фазах ср, Дж/(г·K), теплоту фазового перехода ΔH, Дж/г, а также суммарную энтальпию при охлаждении ΣΔH, Дж/г, образца в измеряемом температурном диапазоне. АПК ТИ включает в себя аппаратную часть и программную часть, позволяющую в режиме реального времени рассчитывать физико-химические параметры на основании графической информации, получаемой в режиме измерения температурной истории под контролем АПК ТИ.

Метод обработки экспериментальных данных основывается на сравнении кривых охлаждения эталона и образца [4], поэтому важным условием работы с аппаратным комплексом является строгий контроль параметров, влияющих на любые отклонения кривых нагрева и охлаждения в процессе измерения. АПК ТИ проводит автоматическое сравнение экспериментальных кривых на любом этапе проведения эксперимента и, в зависимости от настраиваемых параметров, рассчитывает физико-химические свойства с учетом всех колебаний кривых на графике.

В качестве примера исследования приведены расчеты физико-химических параметров теплоаккумулирующих материалов для тригидрата ацетата натрия в смеси с добавками, а также измерены физико-химические свойства нескольких кристаллогидратов и проведено сравнение с литературными данными, соответствие с которыми является подтверждением работоспособности АПК ТИ.

1. Sharma A., Tyagi V.V., Chen C.R., Buddhi D. Renewable and Sustainable Energy Reviews, Vol. 13, pp. 318-345 (2009)
2. Kumar N., Banerjee D., Chaves R. Jr. Journal of Energy Storage. Vol. 20, pp. 153-162 (2018)
3. .M. Morzhukhin, D.S. Testov, S.V. Morzhukhina. Materials Science Forum ISSN: 1662-9752. Vol. 989, pp. 165-171 (2020)
4. A. Solé, L. Miró, C. Barreneche [etc.] Renewable and Sustainable Energy Reviews. Vol. 26, pp. 425-436 (2013)

ВОЗМОЖНОСТЬ НЕРАЗРУШАЮЩЕГО КОНТРОЛЯ ФАЗОВОГО СОСТАВА АУСТЕНИТНЫХ ХРОМОНИКЕЛЕВЫХ СТАЛЕЙ ПО ВЕЛИЧИНЕ УДЕЛЬНОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО СОПРОТИВЛЕНИЯ

Кочнев А.В.[1], Огнева М.С.[1], Ригмант М.Б.[1], Корх М.К.[1]
[1)] Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики металлов им. М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: kochnevav@imp.uran.ru

POSSIBILITY OF NONDESTRUCTIVE TESTING OF AUSTENITIC CHROMIUM-NICKEL STEELS' PHASE COMPOSITION USING ELECTRICAL RESISTIVITY

Kochnev A.V.[1], Ogneva M.S.[1], Rigmant M.B.[1], Korkh M.K.[1]
[1)] M.N. Mikheev Institute of Metal Physics of Ural Branch of Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia

Studies of the relationship between electrical resistivity and the phase composition of austenitic chromium-nickel steels were carried out. Correlation was found between electrical resistivity and ferrite or deformation martensite content in the original or deformed samples, correspondingly.

Определяющим фактором, влияющим на качество аустенитных сталей, их эксплуатационные и технологические свойства, является фазовый состав материала, а именно содержание ферритной фазы (СФФ) и мартенсита деформации, образующегося при деформационных воздействиях. В ферритометрии наибольшее распространение получили магнитные методы контроля. Тем не менее, представляет интерес изучение влияния фазового состава на электрические характеристики, в частности, на удельное электрическое сопротивление.

Для этих целей были исследованы несколько марок аустенитных хромоникелевых сталей (04Х18Н10, 08Х18Н10, 12Х18Н9, 06Х18Н11, 08Х21Н10, 08Х22Н6Т, 08Х22Н6М2) с различным исходным фазовым составом (2,8–80% феррита). Образцы, изготовленные методом электроискровой резки, в дальнейшем подвергали прокатке после охлаждения в жидком азоте для образования в них мартенсита деформации. Общее содержание ферромагнитных фаз в образцах было определено с помощью лабораторной установки сильных магнитных полей по значению намагниченности насыщения. Измерения удельного электрического сопротивления проводились как прибором «Микроомметр специализированный», так и на лабораторной установке для измерения электросопротивления с высокоточным вольтметром по стандартной четырёхконтактной схеме [1]. Результаты согласовывались между собой.

Было установлено, что содержание ферритной фазы в исходных образцах коррелирует с величиной удельного электросопротивления. Появление магнитотвердой фазы мартенсита деформации приводит к значительному увеличению удельного электросопротивления ρ исходно двухфазных (аустенит + феррит) образцов.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «Диагностика», № 122021000030-1)

1. Огнева М.С., Ригмант М.Б., Казанцева Н.В., Давыдов Д.И, Корх М.К., Дефектоскопия, № 9, с.35–43, (2017).

QUADROCOPTER DYNAMICS MODEL

Kononov M.N.[1], Parygina Yu.V.[1], Grobova S.K.[1]
[1)] North Caucasus Federal University, Stavropol, Russia
E-mail: knv_fm@mail.ru

Position control should maintain the position of the quadcopter at the desired location using the current and desired position as input. The control commands for changing the acceleration in position control are calculated based on the proportional-integral-derivative feedback of the position error.

The rotors of the quadcopter are designed in such a way as to provide lifting force acting on the upper part of the quadcopter, while the rotation of the rotors also creates moments. The generated force and torque depend on the speed of rotation of the rotor. The main task is to control the corresponding speeds of the four propellers to ensure a stable flight along a given trajectory. Rotors 1 and 3 rotate counterclockwise and give a clockwise impulse. Rotors 2 and 4 rotate clockwise and give an impulse counterclockwise. All rotors create an upward force perpendicular to the plane of rotation. For Figure 1, the speeds of rotors 2 and 4 are greater than the speeds of rotors 1 and 3. Thus, the effective pulse will be directed counterclockwise and the quadcopter will yaw in this direction. For Figure 2, all four rotors have the same speed. The momentum in the counterclockwise direction will be balanced by the momentum in the clockwise direction. The quadcopter will lift when the sum of the lifting forces exceeds gravity. To develop a dynamic model of the quadcopter, we will install the housing frame on the quadcopter. As shown in the figure, the initial position of the quadcopter body is centered at point O. One shoulder of the quadcopter is designated as the X axis, and the other as the Y axis.

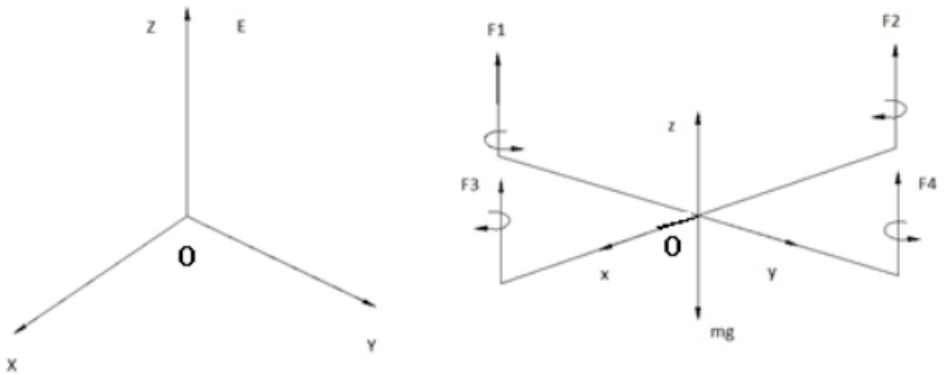


Рис. 1. Coordinate systems and forces acting on the quadrocopter frame

The general coordinate system is denoted as W and is defined by X_w, Y_w, Z_w, as shown in the figure. The frame of the case is marked with the letter B. Each line represents the rotors of the quadcopter. The frame of the case is located at the point O, which is the center of mass of the quadcopter. The direction from O to rotor 1 is defined

as the positive direction X_B, and the direction to rotor 3 is considered the negative direction XB. Similarly, the direction from O to rotor 2 is defined as the positive direction Y_B, and to rotor 4 is the negative direction Y_B. The Z_B direction is the direction from point O opposite to gravity. Rotation around z_W determines the yaw angle ψ, rotation around the x axis located in the middle of the figure determines the roll angle Φ, and rotation around the y_B axis determines the pitch angle θ. The rotation matrix for converting coordinates from B to W is defined by the expression R.

1. Moiseev, V.S., Gushchina D.S., Moiseev G.V. Fundamentals of the theory of creation and application of information unmanned aircraft systems (Series "Modern applied Mathematics and Computer Science") / V.S. Moiseev, –Kazan: Publishing House of the Ministry of Education of the Republic of Tatarstan, 2010.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОВЫХ ПРОЦЕССОВ В СВЕРХЗВУКОВОМ ПЛАЗМОТРОНЕ

Коренева Е.А.[1], Барашев Н.Р.[1, 2], Куклин И.Э.[1], Савельев Д.Д.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Институт химии твердого тела УрО РАН, г. Екатеринбург
E-mail: koreneva-03@list.ru

MODELLING OF THERMAL PROCESSES IN A SUPERSONIC PLASMA GUN

Koreneva E.A.[1], Barashev N.R[1, 2], Kuklin I.E.[1], Savelev D.D.[1]
[1)] Ural Federal University Named After the First President of Russia B.N. Yeltsin, Russia
[2)] Institute of Solid State Chemistry, Ural Branch, Russian Academy of Sciences, Russia

This paper is devoted to development of model of thermal processes in supersonic plasma torch PUN-1 in Solidworks software. As a result, based on the model the volumes of gas and water for efficient cooling of the plasma torch in the process of sputtering were calculated.

Для нанесения восстановительных и функциональных покрытий широко используются технологии плазменного напыления. Благодаря разнообразию конфигураций плазмотронов применение данного метода включает в себя широкий спектр технической промышленности: от создания декоративных покрытий до нанесения биоактивных стеклокерамических покрытий.

Особое место занимают сверхзвуковые плазмотроны. Такие модели позволяют решать задачи, где ключевыми требованиями к покрытию являются низкая пористость (<10-15%) и высокая адгезия к поверхности изделия (>50Мпа). Ускорение плазменной струи до сверхзвуковых значений достигается за счет видоизмененного сопла и дополнительных включений. Однако, такая конструкция приводит к изменению температурного профиля плазмы, локальным перегревам и как следствие к снижению времени работы плазмотрона. [1]

В данной работе предлагается разработка модели тепловых процессов в сверхзвуковом плазмотроне ПУН-1 (рис.1) в программе SolidWorks для визуализации движения потоков воды и газа в камерах охлаждения. Такая модель наглядно продемонстрирует отвод тепла от разогретых деталей плазмотрона и позволит рассчитать объемы газа и воды для его охлаждения и как следствие увеличить время его эксплуатации.

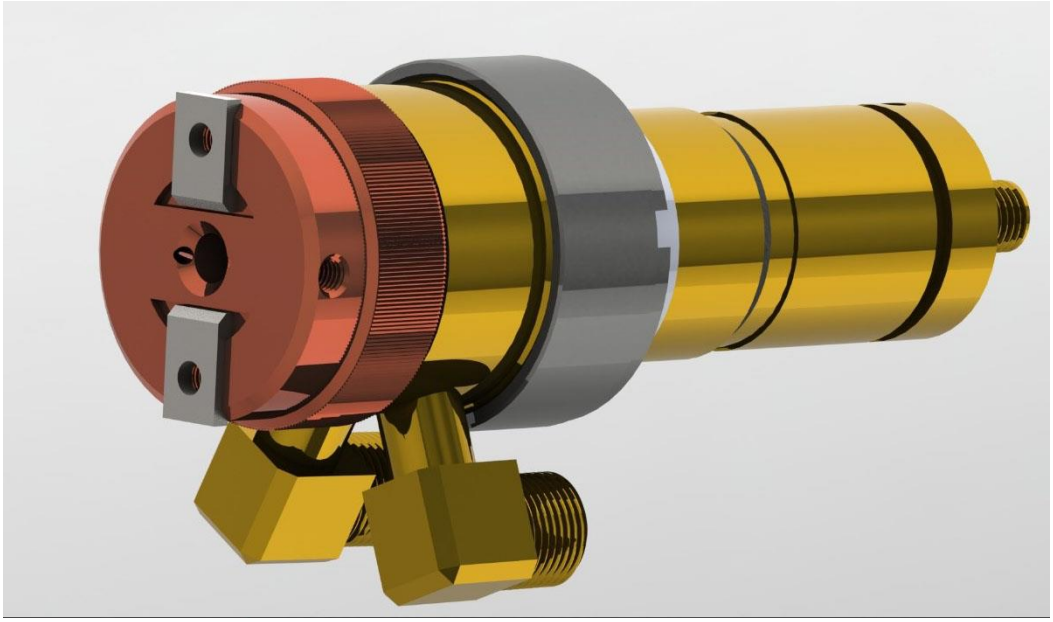


Рис. 1. Плазмотрон ПУН-1

1. Optimal Design of Nozzle for Supersonic Atmosphere Plasma Spraying/ Zhengying Wei , Guangxi Zhao , Y. Bai and Chao Tan; From the journal High Temperature Materials and Processes (2015)

РАЗРАБОТКА ПРИНЦИПИАЛЬНОЙ ОПТИЧЕСКОЙ СХЕМЫ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ВНУТРЕННИХ НАПРЯЖЕНИЙ В КОМПОЗИЦИОННОМ МАТЕРИАЛЕ «МЕТАЛЛ-СТЕКЛО-КЕРАМИКА»

Костров В.С.[1], Шардаков Н.Т.[1], Бушмакин И.М.[2], Решетов В.А.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
[2)] ОАО «ПО Уральский оптико-механический завод имени Э.С. Яламова», г. Екатеринбург, Россия
E-mail: Kostrov-v-s@yandex.ru

DEVELOPMENT OF A BASIC OPTICAL SCHEME FOR DETERMINING INTERNAL STRESSES IN A COMPOSITE MATERIAL LIKE "METAL-GLASS-CERAMICS"

Kostrov V.S.[1], Shardakov N.T.[1], Bushmakin I.M.[2], Reshetov V.A.[1]
[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia B. N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia
[2)] Ural Optical and Mechanical Plant named after Mr. E.S. Yalamov, Yekaterinburg, Russia

A basic optical scheme for determining internal mechanical stresses in a composite material like “metal-glass-ceramics” is developed. Basic elements and components of the installation are selected, their main characteristics are calculated.

Трехслойная структура, включающая тонкий слой стекла, зажатый между керамической и металлической подложками и прочно сцепленный с ними, представляет собой композиционный материал, использующийся, в частности, при изготовлении сборочных единиц (стеков) твердооксидных топливных элементов (ТОТЭ). Поскольку ТОТЭ периодически нагреваются и охлаждаются, их надежная работа возможна только при согласовании ТКЛР керамической и металлической подложек и стекла. Согласование можно считать достигнутым, если уровень внутренних механических напряжений в композите не превысит предел прочности стекла. В настоящее время уровень допустимых напряжений в слоистых композиционных материалах определяется либо расчетным путем [1], либо по результатам натурных испытаний. Однако точность этих методов невелика, поскольку при расчетах не учитываются физико-химические процессы, протекающие на границах сред при формировании композита, а достоверность результатов натурных испытаний ограничена временем испытаний.

В данной работе уровень механических напряжений в слое стекла трехслойного композита «металл-стекло-керамика» предлагается определять по величине двулучепреломления. Принципиальная оптическая схема установки представлена на рисунке 1: световой поток от источника коллимируется конденсором, проходит через поляризатор, попадает на исследуемый образец,

проходит анализатор и фокусируется с помощью объектива в плоскость матричной площадки цифровой камеры, подключённой к персональному компьютеру или ноутбуку.

При прохождении линейно-поляризованного излучения через исследуемое стекло меняется состояние его поляризации, и регистрируемая интенсивность света будет зависеть от ориентации образца относительно поляризатора. Определив распределение интенсивности в плоскости матричного приемника, можно восстановить разность фаз в поперечном сечении стекла и, учитывая ее взаимосвязь с механическими напряжениями, определить их величину.

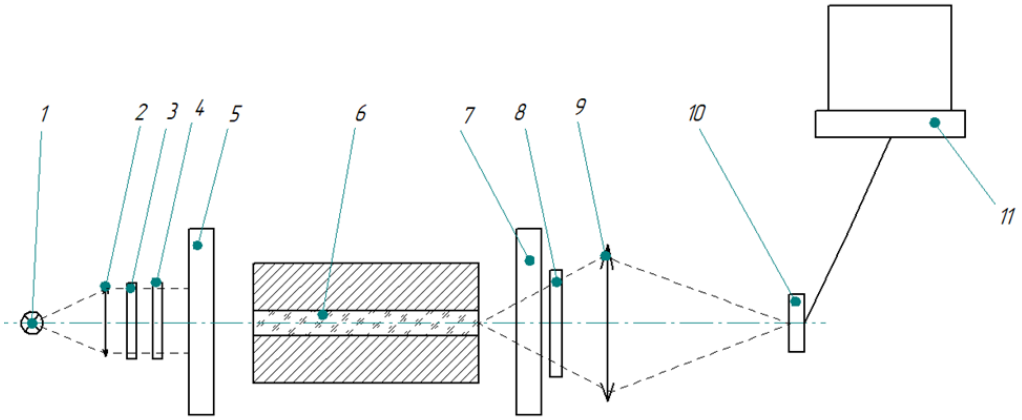


Рис. 1. Структурная схема установки для определения внутренних напряжений в стекле: 1 - источник света, 2 – конденсор, 3 – светофильтр, 4 – матовое стекло, 5 – поляризатор, 6 – исследуемый образец, 7 - анализатор, 8 – пластинка λ/4, 9 – объектив, 10 – цифровая камера, 11 – Персональный компьютер

1. Мазурин О.В. Отжиг спаев с металлом. - Л.: Энергия, 1980. – 140 с.

ПРОГРАММНО-АППАРАТНЫЙ МОДУЛЬ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ СИНАПТИЧЕСКОЙ ПЛАСТИЧНОСТИ МЕМРИСТИВНЫХ СТРУКТУР

Литвинов А.Е.[1], Моисейкин Е.В.[2], Устьянцев Ю.Г.[2], Вохминцев А.С.[2], Гулин А.А.[2]
[1)] НОЦ "НАНОТЕХ", Российская Федерация, Екатеринбург
[2)] Уральский Федеральный Университет, кафедра Физических Методов и Приборов Контроля Качества, Российская Федерация, Екатеринбург
E-mail: aelit2000@gmail.com

SOFTWARE AND HARDWARE MODULE FOR STUDYING THE SYNAPTIC PLASTICITY OF MEMRISTIVE STRUCTURES

Litvinov A.E.[1], Moiseykin E.V.[2], Ustyantsev Y.G.[2], Vokhmintsev A.S.[2], Gulin A.A.[2]
[1)] SEC "NANOTECH", Russian Federation, Ekaterinburg
[2)] Ural Federal University, Department of Physical Methods and Instruments for Quality Control, Russian Federation, Ekaterinburg

A software and hardware module for determining the synaptic plasticity of memristors depending on the parameters of impulse actions has been developed and manufactured.

В настоящее время исследованию мемристивных структур уделяется большое внимание в связи с перспективами их использования в качестве элементов энергонезависимой памяти. Мемристор представляет собой пассивный двухполюсный элемент, который в зависимости от величины протекшего через него электрического заряда, изменяет свое резистивное состояние и сохраняет его в течение длительного времени после окончания воздействия. Кроме того, мемристоры с варьируемой проводимостью могут эмулировать работу биологических синапсов и демонстрировать определенную синаптическую пластичность. Определение оптимальных параметров воздействующих сигналов, режимов переключения и зависящей от времени всплеска пластичности является одно из актуальных задач в области создания твердотельных моделей синапсов для нейрочипов, элементов нейровычислительных систем и искусственных нейронных сетей.

Целью данной работы является разработка программно-аппаратного модуля для определения синаптической пластичности мемристоров в зависимости от параметров импульсных воздействий.

На рисунке 1 представлена структурная схема разрабатываемого устройства. С помощью специализированного программного обеспечения, разработанного для ПК, оператор задает требуемые параметры сигналов, которые будут воздействовать на мемристивную структуру. Соответствующая информация посредством интерфейса USB передается на программно-аппаратный модуль, в

котором МК генерирует необходимые управляющие сигналы для Формирователей 1 и 2. Реализована возможность варьирования основных параметров формируемых импульсных сигналов: амплитуды напряжения, периода, длительности и временного смещения между импульсами на выходах Формирователя 1 и 2.

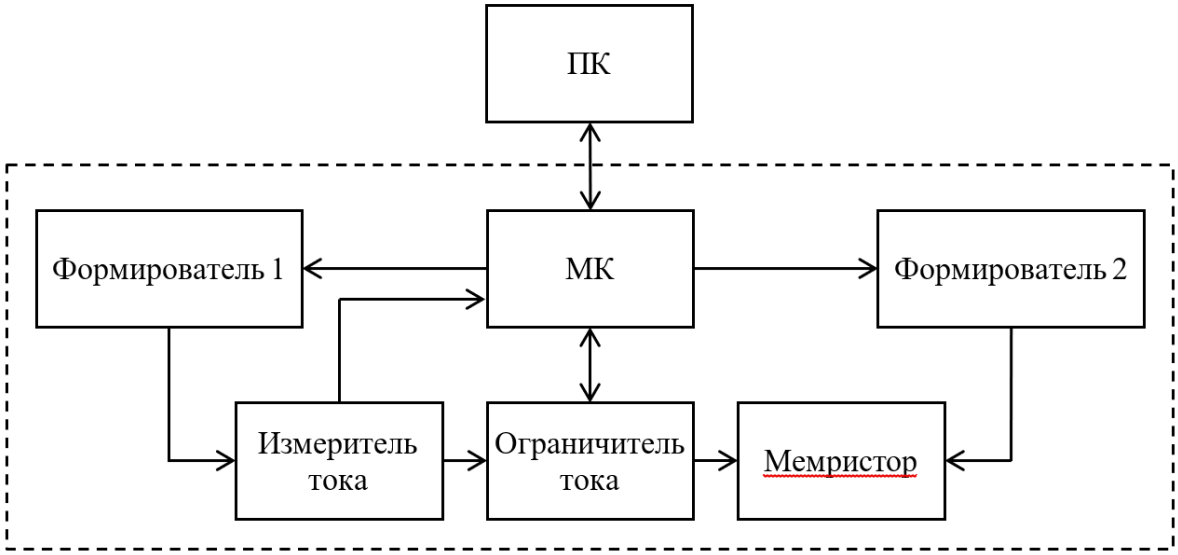


Рис. 1. Структурная схема программно-аппаратного модуля для исследования изменения сопротивления мемристоров

Измеритель тока предназначен для определения текущего значения протекающего тока через мемристивную структуру, что позволяет с помощью Ограничителя тока аппаратным способом отключать исследуемый мемристор от цепи воздействия при превышении заданных токов. Кроме того, по известному току определяется текущее сопротивление мемристивной структуры.

В результате проделанной работы изготовлен программно-аппаратный модуль, способный оказывать управляемое воздействие на мемристивные структуры.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Программы развития Уральского федерального университета имени первого Президента России Б.Н. Ельцина в соответствии с программой стратегического академического лидерства "Приоритет-2030".

1. K.E. Nikiruy. Dopamine-like STDP modulation in nanocomposite memristors / K.E. Nikiruy and oth. // AIP Advances. – №9. – 2019.

РАЗРАБОТКА КОНСТРУКЦИИ 2Х-ОСЕВОГО КООРДИНАТНОГО СТОЛА ДЛЯ ПЕРФОРАЦИИ ПЕЧАТНЫХ ПЛАТ

Лягаев А.П.[1], Огородникова О.М.[1]
[1)] Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: artem.lyagaev@gmail.com

DEVELOPMENT OF 2-AXIS TABLE FOR PERFORATION OF CIRCUIT BOARDS

Lyagaev A.P.[1], Ogorodnikova O.M.[1]
[1)] Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia

In this paper, a coordinate table is proposed that can be used as an automated multifunctional equipment for performing a number of technological operations, including perforation of the printed circuit boards, installation of components into them, laser cutting, and other operations.

Разработка технологического оборудования для приборостроения и электронной индустрии является приоритетным направлением развития машиностроительной отрасли в России. К отличительным особенностям такого оборудования относятся 1) высокая точность позиционирования; 2) применение в массовом производстве; 3) автоматизация и роботизация технологических операций. В данной работе выполнено проектирование координатного стола для пробивания отверстий в многослойных печатных платах [1]. Разработка призвана заместить необоснованно дорогие зарубежные аналоги.

Координатный стол представляет собой мехатронную установку, которая служит для точного перемещения механизма станка или технологического объекта по запрограммированной траектории. Как мехатронное изделие координатный стол объединяет несущую конструкцию, электронную систему управления, приводы и исполнительные механизмы.

На этапе анализа компоновки и составления спецификации выяснено, что конструкция состоит из компонентов, которые можно изготовить с использованием имеющихся станков или купить у отечественных производителей. В конструкцию входит массивное основание, на котором расположены направляющие рельсового типа. По направляющим передвигается платформа в горизонтальной плоскости вдоль двух базовых осей «X» и «Y». Выполнен сравнительный анализ вариантов привода и выбрана шарико-винтовая передача из-за точности, износостойкости, плавности хода и малых люфтов.

Предложенный в проекте координатный стол может быть использован как автоматизированное многофункциональное оборудование для выполнения ряда технологических операций, включая установку компонентов в печатные платы, лазерную резку и другие операции изготовления печатных плат.

1. Щербакова О.И., Граб Ю.А., Белов А.Г., Кочегаров И.И. Методы изготовления многослойных печатных плат // Надежность и качество : Труды международного симпозиума. Пенза : Пензенский государственный университет, 2014. – С. 225-229.

РАЗРАБОТКА 3D-ПРИНТЕРА ДЛЯ ПЕЧАТИ ПЕРСОНАЛИЗИРОВАННЫХ ПОВЯЗОК

Лыкова М. В.[1], Музыка А. Л.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина, Химико-технологический институт, Екатеринбург, Россия
E-mail: Mary.lykova@mail.ru

DEVELOPMENT OF A 3D PRINTER FOR PRINTING PERSONALIZED BANDAGES

Lykova M. V.[1], Muzyka A. L.[1]
[1)] Ural Federal University named after the First President of Russia B. N. Yeltsin, Institute of Chemical Engineering, Ekaterinburg, Russia

Based on research in the field of additive technologies, the development of a 3D printer for creating personalized medical bandages is presented. The possibility of changing the component composition of the polymer thread to improve the consumer properties of the finished product is considered.

Развитие и внедрение аддитивных технологий в отечественную медицинскую промышленность помогает не только решить проблемы, связанные с импортозамещением, но и способствует набирающей обороты кастомизации продукции. С этой точки зрения техническая реализация изготовления индивидуального перевязочного материала с использованием 3D- печати является актуальной задачей в нынешних условиях состояния медицины и промышленности.

На основе анализа мирового рынка аддитивных технологий был сделан выбор в пользу FDM (Fused Deposition Modeling) - технологии, использующей послойную печать. Оценив преимущества и недостатки различных кинематических схем работы 3D-принтеров, мы остановились на так называемой «картезианской кинематике» (устойчивый в цифровой промышленности термин). Главное преимущество такой конструктивной схемы – быстрая скорость печати.

Была разработана схема рабочей части механизма. Скорость печати может быть увеличена без ухудшения качества за счет более низкого веса портала и каретки (экструдера). При печати используется два мотора, которые отвечают за перемещение портала и каретки в соответствии с выбранной «кинематикой» процесса [1,3].

Рабочим материалом является нить на основе PLA-пластика, с нанесенным лигнином. Такие повязки будут обладать антиоксидантными и антимикробными свойствами, а также иметь небольшой вес. Использование решетчатой конструкции с добавлением 2% лигнина позволяет растворимой пленке

замедлить подачу действующих веществ и не дать ране высохнуть. Эта разработка может найти применение в регенеративной и индивидуальной медицине [2,4].

По нашим данным в настоящее время в России пока нет аналога такой продукции. Такие повязки актуальны для больниц, для людей, у которых есть механические повреждения кожного покрова (ожоги, колотые и рваные раны).

В процессе исследования мы столкнулись с выбором необходимых характеристик для наилучшей печати изделия. При оснащенности 3D-принтера подогревом стола, печать возможна просто на стекле. Также использование полной мощности обдува необходимо для получения наиболее качественных результатов при печати из PLA. Своевременное охлаждение не даст возможности пластику деформироваться [5].

При реализации нашей исследовательской работы мы разработали уникальный и инновационный состав нити для 3D-печати с PLA-пластиком и лигнином. Индивидуальная медицина – это активно развивающаяся отрасль. Исследования, сделанные во время работы, помогут развить тему индивидуальных повязок, а также могут послужить инструкцией к их созданию.

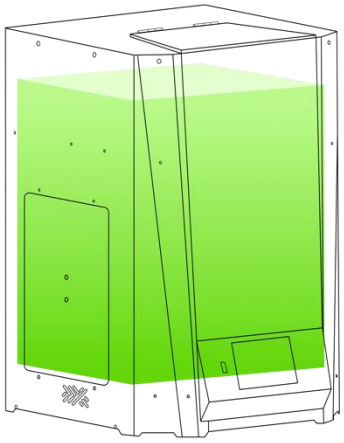


Рис. 1. Макет 3D-принтера.

1. What are the advantages of the FDM technology? – Professional 3D Printers // [Электронный ресурс]: ddrop.com – Электрон. дан. – dddrop.com – Режим доступа: https://www.dddrop.com/fdm-technology/ (дата обращения: 03.08.2019).
2. Witold Jamroz, Joanna Szafraniec, Mateusz Kurek, Renata Jachowicz. 3D Printing in Pharmaceutical and Medical Applications – Recent Achievements and Challenges // Pharm Res. 2018. № 35.

3. Sadia Hassan, Murtaza Najabat Ali, Mariam Mir, Ammad Ahmed, Munam Arshad. Development and evaluation of drug delivery patch for topical wound healing application // Research Article. 2021.
4. ООО «Пластинфо». Новые материалы и марки. // [Электронный ресурс]. URL: https://www.plastinfo.ru/information/news/41759_18.04.2019/.
5. Powernic. Настройки печати PLA пластиком. // [Электронный ресурс] – 2018. URL: https://3d-m.ru/nastrojki-pechati-pla-plastikom/#attachment%20wp-att-22485/0.

РАЗРАБОТКА МЕТОДИКИ КОРРЕКЦИИ СНИМКОВ ЭЛЕКТРОДНЫХ ПЯТЕН, ПОЛУЧЕННЫХ ИНТЕРФЕРЕНЦИОННЫМ МИКРОСКОПОМ NEWVIEW 5010

Максимов А.Д.[1], Азаркевич Е.И.[1], Бекетов И.В.[1, 2], Колеух Д.С.[1]
[1)] Институт электрофизики Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: a.d.maksimov1415@gmail.com

DEVELOPMENT OF A TECHNIQUE FOR CORRECTING IMAGES OF ELECTRODE SPOTS OBTAINED WITH A NEWVIEW 5010 INTERFERENCE MICROSCOPE

Maksimov A. D.[1], Azarkevich E.I.[1], Beketov I.V.[1, 2], Koleukh D.S.[1]
[1)] Institute of Electrophysics of the Ural Division of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia
[2)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

An erosion spots of the spark discharge (SD) was investigated, by using a NewView 5010 interferometric microscope. The spots were obtained on the various metals, using the SD generator of nanoparticles. Also, a technique for restoring the missing data of the interference microscope was developed.

Для получения наночастиц разработан ряд методов, различающихся размерами получаемых наночастиц, скорость синтеза, чистота образцов и др. Одним из интересных методов является метод искрового разряда. Это один из газофазных методов синтеза наночастиц. Он основан на испарении металлических электродов под действием искровых разрядов. Главной особенностью метода является высокая удельная поверхность получаемых нанопорошков. При этом размер частиц может достигать единиц нанометров [1,2]. Однако метод имеет низкую производительность из-за низкого энергетического вклада в испарение материала электродов [3], что ограничивает область его применения как способа получения конструкционных наноматериалов. Для исследования явления электроэрозии и возможности повышения производительности были проведены исследования пятен разряда на электродах при помощи интерференционного микроскопа NewView 5010 компании Zygo (USA).

В работе [4] исследовались пятна разряда на железном электроде и установлена зависимость между вложенной энергией и испаряемым веществом в одиночном искровом разряде. Настоящее исследование расширяет ранее полученные знания об эрозии электродного материала, за счет увеличения спектра используемых материалов в качестве электродов. Однако снимки,

полученные микроскопом, имеют ряд дефектов: пропуски данных, «выбросы» (данные, не имеющие физического смысла), а также зашумленность поверхности. Причинами их возникновения являются крутые склоны поверхности пятен разрядов, а также, по-видимому, низкая отражающая способность отдельных участков. Поскольку для анализирования физических параметров пятен разрядов необходимы как можно более качественный массив данных, была разработана методика восстановления снимков путем линейной интерполяции с последующим усреднением результатов.

1. Kornyushin, D., Musaev, A., Patarashvili, A., Buchnev, A., Arsenov, P., Ivanov, M. and Ivanov, V., Effect of the Gas Temperature on Agglomeration of Au Nanoparticles Synthesized by Spark Discharge and Their Application in Surface-Enhanced Raman Spectroscopy, Metals, 13(2), 301, (2023).
2. Mylnikov, D., Efimov, A. and Ivanov, V., Measuring and optimization of energy transfer to the interelectrode gaps during the synthesis of nanoparticles in a spark discharge, Aerosol Science and Technology, 53(12), 1393-1403, (2019).
3. Maksimov, A. D., Beketov, I. V., Bazeev, A. V., Azarkevich, E. I., Medvedev, A. I., Cholah, S. O. and Rasmetyeva, A. V., Measuring the discharge energy in the installation of nanoparticles synthesis by the spark discharge method, AIP Conference Proceedings, 2313, № 1, p. 040002, (2020).
4. Бекетов И.В., Багазеев А.В., Азаркевич Е.И., Колеух Д.С. Исследование электродных пятен от искрового разряда с помощью интерференционного микроскопа, Известия вузов, 61, № 9/2, С. 161-165, (2018)

СИСТЕМА СБОРА ДАННЫХ ТЕРМОПАРНОГО КАЛОРИМЕТРА

Мамонов А.А.[1], Подковыров В.Л.[1], Ярошевская А.Д.[1], Гуторов К.М.[1],
Короленок Е.А.[1], Чернышев В.С.[1]
[1)] АО «ГНЦ РФ ТРИНИТИ», г. Москва, г. Троицк, Россия
E-mail: anton.mamonov2000@yandex.ru

A DAQ-SYSTEM OF THERMOCOUPLE CALORIMETER

Mamonov A.A.[1], Podkovyrov V.L.[1], Yaroshevskaya A.D.[1], Gutorov K.M.[1],
Korolenok E.A.[1], Chernyshev V.S.[1]
[1)] SRC «TRINITI», Moscow, Troitsk, Russia

The DAQ-system of thermocouple calorimeter was created. System takes the measurements of 16 K-type thermocouple signals with a frequency up to 1 kHz. Every thermocouple channel is galvanically isolated. It allows carrying out the measurements under the electromagnet-ic fields of the accelerator.

В течение многих лет отделом магнитных систем АО «ГНЦ РФ ТРИНИТИ» проводятся исследования взаимодействия плазменного потока, генерируемого квазистационарным плазменным ускорителем КСПУ-Т, с твердотельными мишенями [1,2]. Измерение энергосодержания потока, воздействующего на мишень, является неотъемлемой частью изучения процессов модификации поверхности материалов [3]. Точное измерение тепловой нагрузки на поверхности материала под действием плазменного потока, представляет интерес при исследовании процессов эрозии материалов, обращенных к мощным плазменным потокам. Измерения количества теплоты, поглощенной мишенью, проводятся с помощью калориметра, традиционно представляющего собой пластину из тугоплавкого материала, к одной плоскости которой крепится 16 термопар, в противоположную плоскость направляется плазменный поток. Представленная система сбора данных термопарного калориметра позволит детальнее изучить динамику тепловых процессов, определяющих модификацию материалов при воздействии плазменного потока.

В настоящей работе описаны аппаратные и программные средства системы сбора данных термопарного калориметра, отражены результаты измерений энергии плазменного потока, полученных с помощью этого устройства. Из условий эксперимента были сформированы технические требования: диапазон температур термопар в процессе эксперимента 0-120 ^{o}C; частота опроса термопар – от 1 до 1000 Гц; время записи динамики нагревания и охлаждения мишени – до 600 с; обеспечение возможности подключения 16-ти термопар типа-K; наличие оптического входа для внешнего сигнала, запускающего процесс измерений; гальваническая развязка каждой термопары друг от друга. Развязка

необходима, так как измерения проводятся в электромагнитном поле плазменного ускорителя.

Система сбора данных выполнена в виде единого электронного устройства. Оно содержит 16 аналоговых каналов, выполненных на специализированных термопарных усилителях и линейных оптопарах с питанием от импульсных источников напряжения для реализации гальванической развязки. Напряжение с каждого аналогового канала подается на 16-ти канальный аналого-цифровой преобразователь микроконтроллера. С заданной частотой выборки измерения помещаются в микросхему памяти. Серия записи измерений начинается по внешнему оптическому сигналу. Настройка количества каналов, частоты выборки и времени записи, а также обмен данными происходит по интерфейсу RS485. Функциональная схема системы сбора данных термопарного калориметра изображена на Рисунке 1.

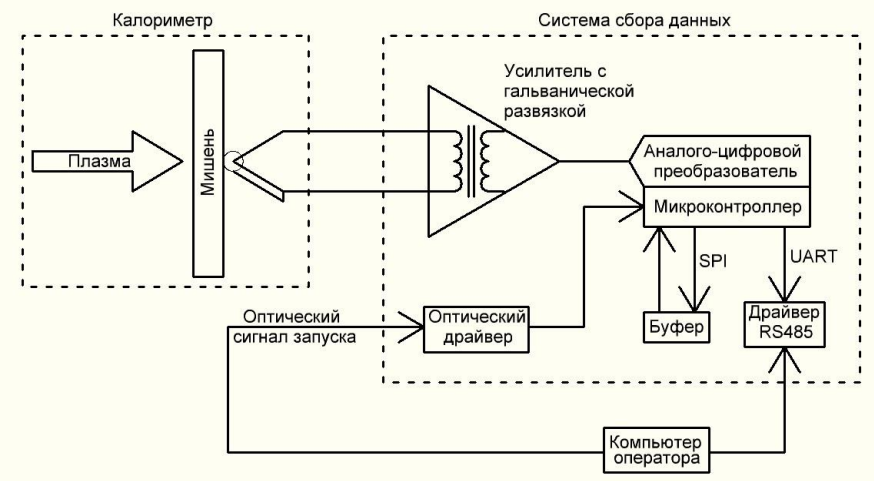


Рис. 1. Функциональная схема системы сбора данных термопарного калориметра

В результате выполнения работы была изготовлена система сбора данных термопарного калориметра, которая расширяет диагностические возможности измерений, проводимых на КСПУ-Т. Преимуществами данного устройства являются высокая скорость опроса термопар, в сравнении со стандартными промышленными система, и низкая стоимость, в сравнении с оборудованием фирмы NI.

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РФФИ № 20-21-00153.

1. Коваленко Д.В., Карташева А.А., Петраков М.В., Подковыров В.Л., Сергеечев А.А., Гуторов К.М., Ярошевская А.Д., Панин С.Е., Барсук В.А. Модификация поверхности металлов под действием мощных потоков излучения плазмы // XLIX Международная Звенигородская конференция по физике плазмы и управляемому термоядерному синтезу. Сборник тезисов докладов. – 2022.– с 209.

2. М.В. Петраков, А.А. Карташева, А.А. Сергеечев, В.Л. Подковыров, К.М. Гуторов. Исследование динамики процесса модификации поверхности материала под действием излучения, генерируемого мощными потоками плазмы. // XVIII Международная конференция «Физико-химические процессы в атомных системах». Техническая программа. – 2022. – с 87.
3. Климов Н.С., Коваленко Д.В., Подковыров В.Л., Кочнев Д.М., Ярошевская А.Д., Урлова Р.В., Козлов А.Н., Коновалов В.С. Экспериментальное исследование интегральных характеристик потока плазмы и разряда квазистационарного сильноточного плазменного ускорителя с собственным магнитным полем // ВАНТ. Сер. Термоядерный синтез. – 2019. – Т. 42, №3. – с. 52-63.

ИЗГОТОВЛЕНИЕ ИНТЕГРИРУЮЩЕЙ СФЕРЫ ДЛЯ ЛЮМИНЕСЦЕНТНОГО СПЕКТРОМЕТРА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ 3D-ПРИНТЕРА

Матвеев А.А.[1], Трофимова К.Е[2], Ищенко А.В.[2], Вайнштейн И.А.[2]
[1)] НПО Автоматики им. академика Н.А.Семихатова, Екатеринбург, Россия
[2)] НОЦ "Наноматериалы и нанотехнологи", Уральский федеральный университет
E-mail: andreymatveev92@yandex.ru

3D-PRINTED INTEGRATION SPHERE FOR THE FLUORESCENCE SPECTROMETER

Matveev A.A.[1], Trofimova K.E.[2], Ishchenko A. V.[2], Weinstein I. A.[2]
[1)] NPO Automation named after academician N.A. Semikhatov, Yekaterinburg, Russia
[2)] NANOTECH Centre, Ural Federal University, Yekaterinburg, Russian Federation

The photoluminescence quantum yield is an important characteristic of new materials. The aim of this work is developing 3D-printed integrating sphere for determining the photoluminescence quantum yield of new materials in crystal or thin film forms.

Исследование оптических свойств новых соединений является одним из важных и сложных задач в области исследования физико-химических свойств материалов. Определение квантового выхода люминесценции обычно проводят двумя методами: измерение значения квантового выхода относительно известного эталона, например, родамина и измерение абсолютного квантового выхода. Во втором случае необходимо использовать интегрирующую сферу для сбора оптического излучения от образца.

Отметим, что измерение квантового выхода люминесценции является важнейшим этапом аттестации новых оптических материалов. В то же время не все серийные приборы оснащены такой функцией, даже в качестве дополнительной опции. В настоящей работе для расширения функционала люминесцентного спектрометра Perkin Elmer LS-55 в программном комплексе SoilidWorks была разработана оригинальная трехмерная модель интегрирующей сферы и затем, по созданным чертежам, напечатана на 3D-принтере Hover 3D.

Напечатанная сфера закреплена на основании, диаметр устройства составляет 50 мм, в конструкции предусмотрены два отверстия для оптоволокна ввода и вывода света в спектрофлюориметр. Напротив ввода излучения устанавливается образец в держателе с нишей диаметром 12 мм. В держатель могут помещаться как запрессованные порошкообразные материалы, так и тонкопленочные образцы. После обработки и шлифовки заготовки сферы на всю поверхность тонким равномерным слоем был запрессован порошок $BaSO_4$, являющийся моделью абсолютно белого тела в требуемом диапазоне длин волн 200-900 нм.

Для тестирования интегрирующей сферы был использован порошок $CsVO_3$ с известным квантовых выходом, запрессованный в форму держателя образцов. Методами фотолюминесцентной спектроскопии был измерен квантовый выход, методика измерения и полученные результаты приведены в работе. Показано, что разработанная интегрирующая сфера удовлетворяет всем требованиям для исследований оптических свойств материалов органической и неорганической природы. В докладе обсуждаются особенности конструкции разработанной интегрирующей сферы и результаты оценки квантового выхода для различных соединений.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Программы развития Уральского федерального университета имени первого Президента России Б.Н. Ельцина в соответствии с программой стратегического академического лидерства «Приоритет-2030».

РАЗРАБОТКА НАМАГНИЧИВАЮЩЕЙ СИСТЕМЫ С ФЕРРОМАГНИТНЫМИ КОЛЕСАМИ ДЛЯ МАГНИТНЫХ СКАНЕРОВ-ДЕФЕКТОСКОПОВ БУРИЛЬНЫХ ТРУБ

Михайлов Л.В.[1], Михайлов А.В.[1], Никитин А.В.[1], Гобов Ю.Л.[1], Костин В.Н.[1], Смородинский Я.Г.[1]

[1)] Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, Екатеринбург, Россия

E-mail: mikhaylov_lv@imp.uran.ru

DEVELOPMENT OF A MAGNETIZING SYSTEM WITH FERROMAGNETIC WHEELS FOR MAGNETIC FLAW DETECTORS OF DRILL PIPES

Mikhailov L.V.[1], Mikhailov A.V.[1], Nikitin A.V.[1], Gobov Yu. L.[1], Kostin V.N.[1], Smorodinskii Ya. G.[1]

[1)] Mikheev Institute of Metal Physics, Ural Branch, Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia

This paper presents the development and design of a magnetization system for magnetic drill pipe flaw detectors, which integrates ferromagnetic wheels that are in contact with the test object (drill pipe wall).

В данной работе представлена разработка и предложена конструкция системы намагничивания для магнитных сканеров-дефектоскопов бурильных труб, в которую интегрированы контактирующие с объектом контроля (стенкой бурильной трубы) ферромагнитные колеса.

Магнитная цепь, аналогично с представленной ранее в работе [1], представляет собой замкнутую магнитную цепь (П-образный магнит) для создания в стенке бурильной трубы однородного магнитного поля, близкого к полю технического насыщения. Контактные колеса предназначены для обеспечения постоянного контакта между магнитной цепью и поверхностью трубы, что обеспечивает эффективное и надежное намагничивание.

Для разработки и оптимизации геометрических параметров намагничивающей системы проведена серия расчетов методом конечных элементов. В работе проанализировано распределение магнитного поля, создаваемого системой, и оптимизированы параметры схемы для достижения максимальной напряженности и однородности поля.

Результаты демонстрируют эффективность системы намагничивания для магнитных сканеров-дефектоскопов бурильных труб, в которую интегрированы ферромагнитные колеса. Система представляет собой надежное и эффективное

решение для неразрушающего контроля поверхностей бурильных труб с потенциальным применением в нефтегазовой отрасли.

Работа выполнена в рамках Г.р.№ АААА-А18-118020690196-3 (шифр «Диагностика»).

1. Simulation of a closed-loop magnetizing system for a portable drill pipe magnetic flaw detector / A. V. Mikhailov, Yu. L. Gobov, A. V. Nikitin, S. E. Popov, L. V. Mikhailov, L. I. Antokolsky // AIP Conference Proceedings. — 2022. — V. 2466. — P. 40009 (6 pages)

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОБЛАСТИ ПРИМЕНЕНИЯ МЕТОДИКИ РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ ГЕОМЕТРИЧЕСКОЙ ЗАДАЧИ МАГНИТОСТАТИКИ ДЛЯ ПОВЕРХНОСТНЫХ ДЕФЕКТОВ ФЕРРОМАГНЕТИКА

Никитин А.В.[1], Михайлов Л.В.[1], Михайлов А.В.[1], Гобов Ю.Л.[1], Костин В.Н.[1], Смородинский Я.Г.[1]
[1)] Институт Физики Металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
E-mail: an@imp.uran.ru

DETERMINING THE APPLICATION AREA OF THE TECHNIQUE FOR SOLVING THE INVERSE GEOMETRIC PROBLEM OF MAGNETOSTATICS FOR SURFACE DEFECTS OF A FERROMAGNET

Nikitin A.V.[1], Mikhaylov L.V.[1], Mikhaylov A.V.[1], Gobov Yu.L.[1], Kostin V.N.[1], Smorodinskii Ya.G.[1]
[1)] M.N. Mikheev Institute of Metal Physics of Ural Branch of Russian Academy of Science, Ekaterinburg, Russia

Magnetic flux in a ferromagnetic plate containing a defect under its tangential magnetization is considered. Magnetic flux is the key that determines the size of defects for which the inverse geometric problem can be solved by present methodology. Results of numerical experiments are presented.

Наиболее популярным методом экспресс анализа проблемных областей в ферромагнитных изделиях является метод рассеяния магнитного потока (MFL) [1].

Недостатком упомянутого метода является то, что это индикаторный метод, то есть для принятия решения о критичности дефекта для дальнейшей эксплуатации изделия зачастую приходится проводить дополнительные исследования в специально оборудованных цехах, что связано с увеличением временных и финансовых затрат на инспекцию. Исходя из сказанного, развитие MFL метода до метода дефектометрии чрезвычайно актуально.

Для обнаруживаемых MFL методом поверхностных дефектов, предлагаемая методика позволяет восстанавливать геометрические параметры формы дефекта. Исключением являются только трещины и трещинообразные дефекты [2] в которых основная часть магнитного потока проходит сквозь дефект. В работе, в результате проведения численных экспериментов, показаны предельные размеры дефектов, для которых удается описать геометрические параметры формы.

Вывод из проведенных работ можно сформулировать следующим образом: при достаточном раскрытии поверхностного дефекта произвольной формы, что позволит выделить дефект из класса дефектов типа трещина и трещинообразный, предлагаемая методика [3-4] способна описывать геометрические параметры формы такого дефекта.

Перспективой дальнейшего развития предложенной методики является разработка алгоритмов и комплекса программ для автоматического определения формы и размеров дефектов ферромагнитных изделий. Такие программные комплексы могут найти применение, например, в мобильных дефектоскопах для неразрушающего контроля бурильных труб. Поскольку характерными дефектами тела бурильной трубы являются: износ внутренней поверхности в виде сквозных каверн, раковины на внутренней поверхности, утонение стенок трубы. Отсутствие трещин в теле бурильной трубы позволит использовать предложенную методику в качестве методики дефектометрии труб.

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме «Диагностика», № АААА-А18-118020690196-3

1. Неразрушающий контроль: справочник: в 8 т. Т. 6 Кн. 1 / под ред. В.В. Клюева. М.: Машиностроение, 2006
2. Specifications and requirements for in-line inspection of pipelines, 2016, https://pipelineoperators.org/
3. Yu. L. Gobov, A. V. Nikitin, S. E. Popov Solving the Inverse Geometric Problem of Magnetostatics for Corrosion Defects. — Russian Journal of nondestructive testing, 2018, v. 54 p 726-732; https://elibrary.ru/item.asp?id=38652516
4. Yu. L. Gobov, A. V. Nikitin, S. E. Popov Solving the Inverse Geometric Problem of Magnetostatics for Corrosion Defects with Allowance for Nonlinear Properties of Ferromagnet. — Russian Journal of nondestructive testing, 2018, v. 54, p 849—854; https://elibrary.ru/item.asp?id=38674783

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ДИСПЕРСИИ ПИКОСЕКУНДНЫХ ИМПУЛЬСОВ НА МИКРОПОЛОСКОВЫХ ЛИНИЯХ ПЕРЕДАЧИ

Патраков В.Е.[1, 2]
[1)] Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Институт Электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: vitpatrakov@gmail.com

EXPERIMENTAL INVESTIGATION OF PICOSECOND PULSE DISPERSION IN MICROSTRIP TRANSMISSION LINES

Patrakov V.E.[1, 2]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia
[2)] Institute of Electrophysics, Yekaterinburg, Russia

Microstrip lines are characterized by frequency dispersion, which leads to distortion of the waveform of transmitted pulses. In this study the effect of this distortion for pulses with rise times as low as 60 ps was experimentally investigated for microstrip lines of different parameters.

Микрополосковой линией передачи (МПЛ) называют двухсвязную линию передачи, выполненную в виде дорожки на диэлектрической подложке (печатной плате), при этом вторым проводником линии является металлизация на обратной стороне платы. В отличие от других распространенных типов двухсвязных линий передачи, например коаксиальных, электромагнитное поле МПЛ распределено между диэлектрической подложкой и воздушным пространством, находящимся над подложкой. Это приводит к тому, что основной волной МПЛ является волна типа квази-ТЕМ, обладающая частотной дисперсией: на низких частотах фазовая скорость волны равна промежуточной скорости между скоростью света в подложке и в воздухе, в то время как на высоких частотах, при которых длина волны в подложке становится сопоставима с её толщиной, фазовая скорость волны падает, и становится равной скорости света в подложке. Физически это явление можно объяснить связью основной волны квази-ТЕМ и поверхностной волны, способной распространяться в диэлектрической подложке МПЛ [1]. На высоких частотах связь этих волн увеличивается, и электромагнитная энергия начинает эффективно передаваться в поверхностную волну, распространяющуюся в подложке.

В настоящее время применение МПЛ актуально для передачи коротких электрических импульсов, например в скоростной цифровой связи [2], а также в технике генерирования и передачи высоковольтных пикосекундных импульсов [3]. Поскольку короткий импульс содержит в себе широкий спектр частот, в МПЛ более высокочастотные компоненты импульса будут распространяться

медленнее низкочастотных, что приведёт к искажению формы импульса. В мощных импульсных устройствах этот эффект может быть использован полезным образом: дисперсия квази-ТЕМ волны в сочетании с нелинейными свойствами подложки применяется для генерации мощных нелинейных СВЧ колебаний и уединённых волн (солитонов) амплитудой в сотни кВ и единицы МВ [4]. При этом в литературе наблюдается недостаток экспериментальных данных по распространению пикосекундных импульсов в МПЛ и подобных ей структурах с квази-ТЕМ волной (например, двухслойных коаксиальных линиях).

В проведённом исследовании было экспериментально изучено искажение прямоугольного и колоколообразного импульсов с длительностью фронта менее 60 пс при распространении по МПЛ. Были исследованы МПЛ, изготовленные на подложках из стеклотекстолита (FR4) и стекла. В ходе исследования варьировалась длина линий и толщина диэлектрика. Полученные осциллограммы были сопоставлены с теоретическими оценками из литературы. Экспериментальные осциллограммы были математически обработаны с применением процедуры деконволюции, для устранения искажений, присутствующих во входном импульсе, и изучения реакции исследуемых линий на более короткие входные импульсы. Полученная таким образом реакция типичной МПЛ на колоколообразный входной импульс длительностью 35 пс представлена на рис. 1. Наблюдается характерное для линий с квази-ТЕМ волной колебательное искажение спада импульса.

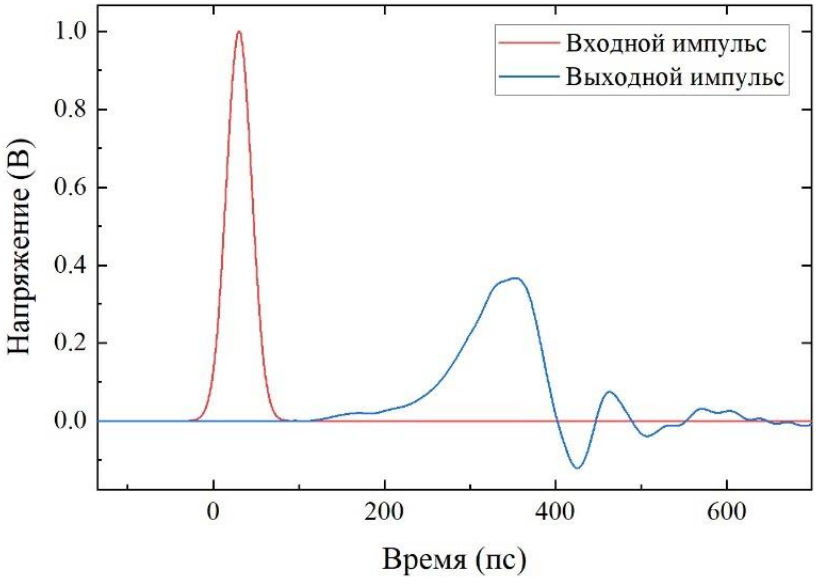


Рис. 1. Осциллограммы входного и выходного импульсов для микрополосковой линии длиной 25 см на подложке из стеклотекстолита

1. Microstrip lines and slotlines / K. C. Gupta, Garg Ramesh, Bahl Inder, Bhartia Prakash. — 2nd ed. — London : Artech House, 1996. — 535 c.
2. Johnson, H. High-speed signal propagation: advanced black magic / H. Johnson, M. Graham. — New Jersey: Prentice Hall, 2003. — 766 c.
3. Patrakov V. E., Pedos M. S., Rukin S. N. Picosecond semiconductor generator for capacitive sensors calibration // Journal of Physics: Conference Series. – IOP Publishing, 2021. – Т. 2064. – №. 1. – С. 012128.
4. Karelin S. Y. et al. Radio frequency oscillations in gyrotropic nonlinear transmission lines // Plasma. – 2019. – Т. 2. – №. 2. – С. 258-271.

МОДЕРНИЗАЦИЯ ПРИЕМНИКА ИЗЛУЧЕНИЯ ПРИЗМЕННОГО СПЕКТРОГРАФА ОПТИЧЕСКОГО СПЕКТРА

Попов А.А.[1], Костюнин А.В.[1], Кокорин А.Ф.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: slymbe@yandex.ru

MODERNIZATION OF THE RADIATION RECEIVER OF THE PRISM SPECTROGRAPH OF THE OPTICAL SPECTRUM

Popov A.A.[1], Kostunin A.V.[1], Kokorin A.F.[1]
[1)] Ural Federal University named after the First President of Russia B.N. Yeltsin

In the course of the work, the optical spectrograph was upgraded in order to capture digital images of the obtained spectra. And also a program was written to scan them.

Современные тенденции и развитие техники за последние десятилетия качественно изменили способы получения, фиксации и анализа экспериментальных данных, в том числе изменились способы фиксации и обработки атомных спектров получаемых с помощью спектрографов. Возможность удобной обработки и передачи получаемых спектров в цифровом формате стимулирует переход на спектрографы с возможностью оцифровки получаемого на приемнике изображения. Однако списание старых приборов и закупка полностью нового оборудования не всегда возможна и целесообразна.

Предлагаемым решением является модернизация приемника излучения спектрографа, изначально не приспособленного для получения цифрового изображения спектра [1]. Модернизация проведена путем замены стандартного приемника с фотопластиной на цифровой фотоаппарат со светочувствительной матрицей.

Данное решение позволило получать изображения спектров в цифровом формате, что предоставляет возможность для автоматизирования процесса обработки данных спектров. Для этих целей на языке python была разработана программа, позволяющая конвертировать цифровое изображение линейчатого спектра в таблицу, состоящую из значений длин волн спектральных линий, для удобства дальнейшего использования данных. Конвертация происходит благодаря созданию виртуальной оси, по которой происходит привязка длины волны в нанометрах к положению линии на изображении. Привязка осуществляется путем снятия образцового спектра и калибровки виртуальной оси по известным линиям.

Кроме того, данное решение позволяет получать спектры с высокой частотой фиксации, точные значения которой зависят от аппаратных возможностей конкретного фотоаппарата. При этом, время экспозиции для фотопластин может

составлять несколько секунд. Такое уменьшение временного интервала для получения спектра позволяет фиксировать изменения в спектре в динамике, например при разрушении образца в потоке горячей плазмы (имитация прохождения космическими объектами атмосферы Земли).

В перспективе представленное решение позволит по этому же пути провести модернизацию спектрографов, работающих в диапазоне от 380 до 900 нанометров [2].

1. Нагибина И. М., Прокофьев В. К., Спектральные приборы и техника спектроскопии, Издание 2-е, дополненное и переработанное, Ленинград, 1967, 328 с.
2. Таблицы физических величин, Справочник, Под ред. акад. И. К. Кикоина, Атомиздат, 1976, 1008с.

СОЗДАНИЕ ПЛАЗМОТРОНА ДЛЯ НАПЫЛЕНИЯ ВНУТРЕННИХ ПОВЕРХНОСТЕЙ ОТНОСИТЕЛЬНО МАЛОГО ДИАМЕТРА

Савельев Д.Д.[1], Барашев Н.Р.[1, 2]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Институт химии твердого тела УрО РАН, г. Екатеринбург
E-mail: rjirjirei@mail.ru

DEVELOPMENT OF THE PLASMA TORCH FOR SPRAYING INTERNAL SURFACES OF RELATIVELY SMALL DIAMETER

Savelev D.D.[1], Barashev N.R.[1, 2]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia
[2)] Institute of solid state chemistry of UB RAS, Yekaterinburg, Russia

This paper describes the design and development of the plasma torch for spraying the internal surfaces of parts. The technical characteristics of the developed product are given.

В промышленности множество деталей подвергаются высоким нагрузкам, вследствие чего возникает необходимость в создании защитных покрытий, увеличивающих их срок службы, а также эксплуатационные характеристики. Одним из основных методов создания защитных покрытий является плазменное напыление. К преимуществам данного метода можно отнести высокую производительность, вследствие большой концентрации энергии, простоту, невысокую себестоимость, а также возможность работы в широком спектре напыляемых материалов. При этом, поверхности, модифицированные данным методом, будут превосходить по качеству поверхности, модифицированные электрохимическими методами [1]. Также применение плазменных источников энергии наиболее выгодны, по сравнению с применением электродуговых и лучевых источников [2].

Для ряда задач, к примеру нанесение покрытий на внутренние поверхности деталей требуется плазмотрон особой конструкции. В связи с чем целью данной работы является разработка плазмотрона, позволяющего выполнять данные операции.

Для конструирования и моделирования рабочих частей плазмотрона использовались Solidworks и Компас 3д (Рисунок 1). Рабочая часть имеет размеры 39*38*32 мм. Она вынесена от рукояти на нескольких трубках, обеспечивающих подвод ресурсов в плазмотрон от внешних источников. Далее эти трубки продолжаются с другой стороны рукояти и обеспечивают подключение к системам. Для соответствия требованиям безопасности, в конструкции предусмотрена система изоляторов. Для защиты рабочей поверхности предусмотрена система охлаждения. Благодаря дополнительным

секциям по 1000 мм рукоять данного плазмотрона позволяет иметь настраиваемую длину, что увеличивает спектр возможностей. Рабочие характеристики: мощность 16 кВт, давление воды 10 бар, потребление воды 17 л/мин, длина: 1200 мм + дополнительные секции по 1000 мм каждая, диаметр рукояти 45 мм, минимальный диаметр внутренней поверхности для напыления 70мм. Работа с газами Ar/H_2, Ar/N_2, Ar/He. В качестве материалов для изготовления использовались: сплавы латуни, меди, стали, вольфрама.

В результате разработан плазмотрон, который позволяет напылять на внутренние поверхности относительно малого диаметра (от 70 мм) различные функциональные покрытия.

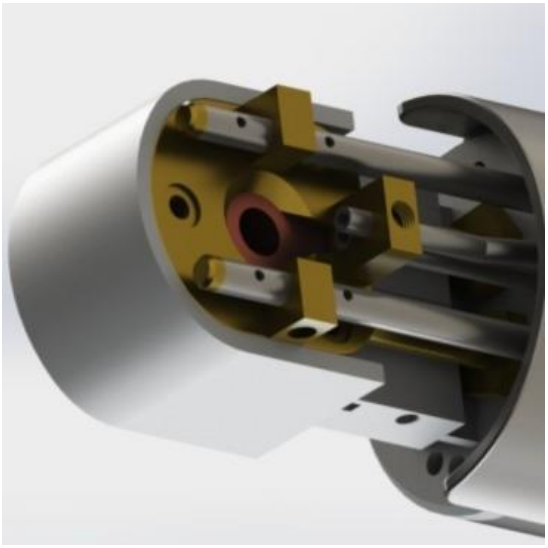


Рис. 1. 3D-модель плазмотрона для напыления внутренних поверхностей деталей с узким диаметром.

Проверка работоспособности изделия проводилась в среде Solidworks simulation. Были проведены симуляции систем охлаждения, газовой системы. Произведен расчеты тепловых нагрузок.

1. Espallargas N., Berget J., Guilemany J., Benedetti A., Suegama P, Surf. Coatings. Technol., 202, 1405–1417 (2008)
2. Mrad, O.; Saunier, J.; Aymes Chodur, C.; Rosilio, V.; Agnely, F.; Aubert, P.; Vigneron, J.; Etcheberry, A.; Yagoubi, N. A Comparison of Plasma and Electron Beam-Sterilization of PU Catheters. Radiat. Phys. Chem., 79, 93–103 (2010)

ПОРТАТИВНЫЙ ГЕНЕРАТОР СИНХРОНИЗИРУЮЩИХ ИМПУЛЬСОВ

Смольникова Е.Н.[1], Осипенко Е.А.[2]
[1)] Уральский Федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург
[2)] Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург
E-mail: eli2ave7a@yandex.ru

PORTABLE GENERATOR OF SYNCHRONIZING PULSES

Smolnikova E.N.[1], Osipenko E.A.[2]
[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia B. N. Yeltsin , Yekaterinburg
[2)] Institute of electrophysics, Yekaterinburg

A portable digital generator of synchronizing (delayed) pulses has been developed. This device is compact and battery powered, which simplifies the tuning of experimental setups and allows them to be used outside the laboratory.

Для работы установок, состоящих из двух и более импульсных устройств, требуется взаимная синхронизация составных частей. Синхронизация осуществляется с помощью импульсных управляющих сигналов, включающих устройства в заданное время. Такие последовательности импульсов формируются с помощью специальных приборов – генераторов задержанных или синхронизирующих импульсов (ГСИ). Многоканальные ГСИ могут быть отдельным прибором в настольном или стоечном исполнении или состоять из нескольких последовательно соединенных генераторов импульсов. Стационарные, а тем более состоящие из нескольких приборов, ГСИ не всегда удобны в условиях эксперимента или при выездных работах, так как не обладают необходимой мобильностью. В связи с этим стала необходимостью разработка переносного портативного ГСИ с автономным питанием.

Все устройства задержки электромагнитных сигналов можно разделить на линии задержки (пассивные устройства) и формирователи задержанных импульсов (активные устройства) [1]. Отсчет временных интервалов в активных устройствах формирования импульсов может осуществляться с помощью, как аналоговых цепей, так и цифровых схемотехнических решений. В разработанном ГСИ применен принцип счета тактовых импульсов от высокочастотного тактового генератора.

Портативный ГСИ собран в пластиковом корпусе размерами 190x140x40 мм и питается от 4 элементов типоразмера АА. Прибор основан на микроконтроллере фирмы Microchip - Atmega88, который является как времязадающим, так и управляющим устройством ГСИ. Собранный ГСИ имеет 3 входных канала. Импульсные сигналы каждого канала имеют положительную

полярность и амплитуду 12±3 В, а их длительность и задержки между каналами задаются пользователем в интервалах от 10 до 50 мкс и от 10 мкс до 10 мс соответственно. Дискретность установки, как длительности выходных импульсов, так и задержек между каналами составляет 0,5 мкс. Настройки прибора вводятся с помощью органов управления (кнопок), расположенных на лицевой панели прибора, и отображаются на экране 4-х строчного жидкокристаллического индикатора.

Разработанный ГСИ имеет практическую ценности и позволяет, в частности, упростить настройку экспериментальных установок.

1. Ерофеев Ю. Н. Импульсные устройства. - М.: Высшая школа, 1989. - 526 с.
2. Ревич Ю. В. Практическое программирование микроконтроллеров Atmel AVR на языке ассемблера. – 2-е изд. – СПб.: БХВ-Петербург, 2011. – 352 с. ил.: – (Электроника).

УНИВЕРСАЛЬНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ ЦИФРОВОГО ГЕНЕРИРОВАНИЯ И АНАЛИЗА МАГНИТНОГО ПОЛЯ С ПРОИЗВОЛЬНОЙ ВРЕМЕННОЙ ЗАВИСИМОСТЬЮ

Унгвицкий Г.И.[1], Костин В.Н.[1]
[1)] Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: u2012gleba@gmail.com

UNIVERSAL COMPLEX FOR DIGITAL GENERATION AND ANALYSIS OF MAGNETIC FIELD WITH ARBITRARY TIME DEPENDENCE

Ungvitskii G.I.[1], Kostin V.N.[1]
[1)] Institute of Metal Physics named after M.N. Mikheev, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia

The experimental sample of the universal complex for digital generation and analysis of a magnetic field with an arbitrary time dependence has been developed. The device consists of a control unit, a current stabilizer, a Hall sensor, an amplifier, a Jim Williams current source and a coil.

Датчики Холла, основанные на одноимённом эффекте, открытом Эдвином Холлом в 1879 году, сегодня находят широкое применение в научной и технической сфере. Их используют для измерения напряжённости магнитного поля, бесконтактных выключателях, герконах, при измерении силы тока, уровня жидкости и других областях. Также их большим преимуществом являются малые габариты, которые с течением времени только уменьшаются, благодаря совершенствованию технологий изготовления кремния и сверхчистого германия.

До сих пор разрабатывается оборудования для корректной обработки сигнала, поступающего с датчика Холла. В работе «Симметричный усилитель сигнала с датчика Холла» представлена схема усилителя на транзисторах, позволяющего увеличить на порядок чувствительность датчика и обеспечивающая постоянную, необходимую силу тока. Недостатком данной работы является то, что для каждого датчика требуется подбирать соответствующие резисторы и комплиментарные пары транзисторов, что по своей сути заставляет разработчика устройств заново рассчитывать и изготавливать обрабатывающее устройство для нового датчика Холла. Следует отметить, что современные датчики обладают малыми размерами и сопротивлением.

В результате анализа современного состояния и тенденций развития магнитометрии была поставлена задача создать экспериментальный образец универсального комплекса для измерения и генерирования магнитного поля с произвольной формой сигнала, способным: измерять поле от 5 мкТл до 1 Тл и

частотой до 100 кГц и генерировать ток для катушки до 100 кГц с диапазоном до 200 мА.

В результате проделанной работы был изготовлен экспериментальный образец универсального комплекса для цифрового генерирования и анализа магнитного поля с произвольной временной зависимостью, в составе которого присутствуют стабилизатор тока, усилитель сигнала с датчика Холла, источник тока Джима Вилльямса, а также ряд других вспомогательных узлов (рисунок 1).

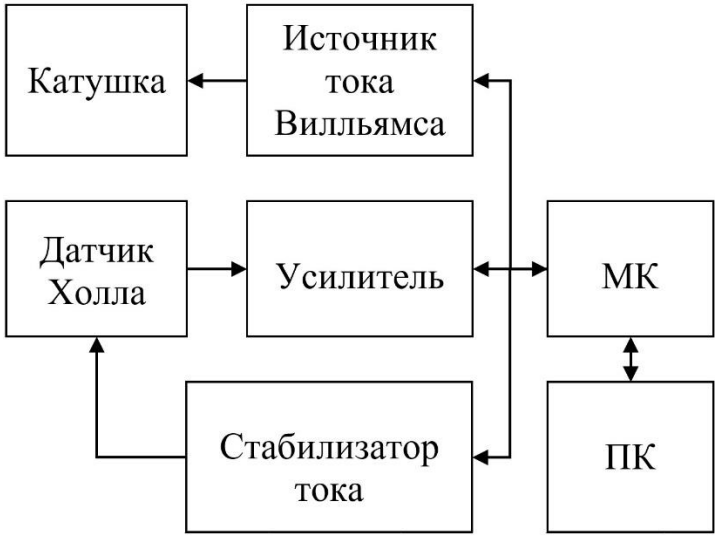


Рис. 1. Блок-схема универсального комплекса для измерения и генерирования магнитного поля с произвольной формой сигнала

Принцип работы устройства следующий: стабилизатор тока создаёт в датчике Холла необходимую номинальную силу тока, в зависимости от внешнего магнитного поля датчик генерирует разность потенциалов, которая с помощью цифровой регулировки преобразуется усилителем до адекватного для аналого-цифрового преобразователя (АЦП) микроконтроллера (МК) диапазона напряжений, далее посредством АЦП происходит измерение сигнала и соответствующая осциллограмма выводится на экран персонального компьютера (ПК). Также возможно параллельное генерирование магнитного поля с помощью катушки, это осуществляется за счёт формирования сигнала цифро-аналоговым преобразователем (ЦАП) и усилением его за счёт источника тока Джима Вилльямса.

Созданный экспериментальный образец блоков универсального комплекса для измерения и генерирования магнитного поля с произвольной формой сигнала выполняют свою функцию в соответствие с заданными к ним требованиями.

1. Реутов Ю.Я. Обнаружители намагниченных предметов (теория и практика индукционного обнаружения) – Екатеринбург, 2018. – 336 с.

2. Кофлин Р., Дрискол Ф. Операционные усилители и линейные интегральные схемы. -.: Мир, 1979
3. Хоровиц П., Хилл У., Искусство схемотехники: В 3 тома: Т.1. Пер. с англ. – 4-е изд., перераб. и доп. – М.: Мир (1993).
4. Папина А.С. Датчики Холла: принцип работы, типы, применение [Электронный ресурс] Тезисы / А.С. Папина // Иваново: Пятнадцатая всероссийская (седьмая международная) научно-техническая конференция студентов, аспирантов и молодых ученых: материалы конференции. Иваново: 07–10 апреля 2020 г. – 128с. – URL: https://www.elibrary.ru/download/elibrary_42667938_30226876.pdf.
5. Шампаров Е.Ю. Симметричный усилитель сигнала с датчика Холла [Электронный ресурс] Тезисы / Е.Ю. Шампаров, И.Н. Жагрина, А.Д. Топорищева // Москва: Инновационное развитие техники и технологий в промышленности (интекс-2021) Москва: 12–15 апреля 2021 г. – 245 – 248с. – URL: https://www.elibrary.ru/download/elibrary_46335869_46542947.pdf

ЭКСРЕСС-АНАЛИЗ СОСТАВА МОЛОЧНОЙ ПРОДУКЦИИ С ПРИМЕНЕНИЕМ МЕТОДОВ ИК-СПЕКТРОСКОПИИ

Заневская М. Ю.[1], Мазинг М.С.[2], Чередникова А.А.[2, 3], Зайцева А.Ю.[2]
[1)] Санкт-Петербургский государственный университет аэрокосмического приборостроения, г. Санкт-Петербург, Российская Федерация
[2)] Институт аналитического приборостроения РАН, г. Санкт-Петербург, Российская Федерация
[3)] Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого», г. Санкт-Петербург, Российская Федерация
E-mail: mnevskaya1@gmail.com

EXPRESS ANALYSIS OF THE COMPOSITION OF DAIRY PRODUCTS USING INFRARED SPECTROSCOPY METHODS

Zanevskaya M.Y[1], Mazing M.S.[2], Cherednikova A.A.[2, 3], Zaitceva A.Y[2]
[1)] St. Petersburg State University of Aerospace Instrumentation, St. Petersburg, Russia
[2)] Institute of Analytical Instrumentation, Russian Academy of Sciences, St. Petersburg, Russia
[3)] Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia

An advanced spectrum analyzer was developed to solve the problem of express quality assessment of dairy products. Machine learning methods were used to process the results. The result of processing was a digital image of the sample and a graph in the space of principal components.

Молочная продукция – продукт ежедневного спроса, ее современное производство требует эксплуатации точных и быстрых методов контроля свойств и показателей состава выпускаемой продукции [1]. Для качественной и количественной оценки отдельных компонентов состава применяются следующие способы: фотометрические, ультразвуковые, кондуктометрические, ИК-спектроскопия и другие [2]. Широкое распространение получила именно ИК-спектроскопия благодаря тому, что за короткий промежуток времени позволяет зарегистрировать неповторимый ИК-спектр всех химических соединений в составе исследуемого образца [3].

В процессе работы были изучены 18 образцов молока, среди которых 10 – промышленного производства, 8 – индивидуальных фермерских хозяйств. Исследование было проведено с использованием разработанного современного многоканального анализатора спектров, имеющего массив из 18 быстродействующих фоточувствительных элементов, работающих на длинах волн от 410 до 940 нм, и 3-х источников излучения, время анализа одного образца составляет 10 секунд [4]. Для проведения анализа каждый образец предварительно заливался в специально изготовленную емкость черного цвета.

В результате последующего многомерного статистического анализа данных были получены индивидуальные воспроизводимые «цифровые образы» каждого образца в виде комбинации показателей оптических сенсоров. Применение метода главных компонент для изучения структуры данных и поиска взаимосвязи между образцами выявило тенденцию к кластеризации образцов молока промышленного производства и их явное отличие от образцов молочной продукции индивидуальных фермерских хозяйств.

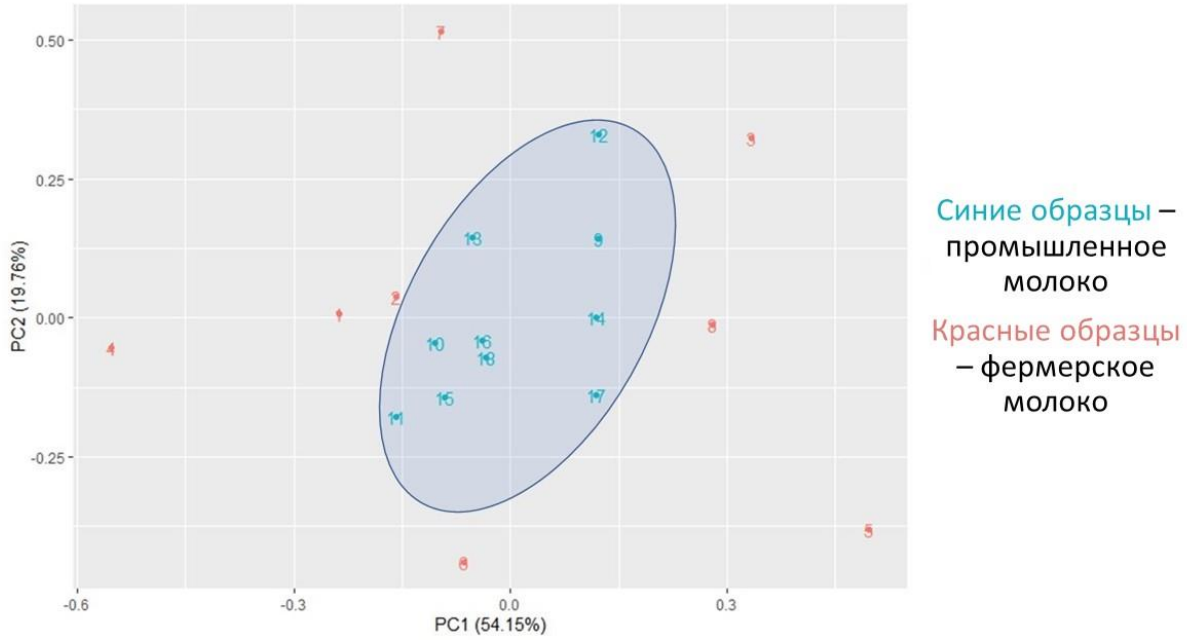


Рис. 1. Результат визуализации многомерных данных, полученных с помощью оптических датчиков, в пространстве двух первых главных компонент, где образцы, обозначенные синим цветом – промышленная молочная продукция; красным – молочная продукция индивидуальных фермерских хозяйств.

Полученные результаты свидетельствуют об эффективности разработанной оптической системы для качественной оценки состава молочной продукции. Использование предлагаемого метода не требует наличия высококвалифицированных специалистов и специальных химических реактивов. Способ позволяет быстро и объективно выявлять отклонения в составе продукции. Оптическая система может быть рекомендована к использованию в качестве экспресс-метода для производственного контроля качества и безопасности выпускаемой продукции.

1. Калач А. В., Рудакова Л. В., Полянский К. К. Экспресс-контроль качества молочных продуктов с применением пьезосенсоров //Молочная промышленность. (2009. – №. 1, С. 56-57.)

2. Кругова Л. Л., Бондарь Н. Ф. Высокоэффективные методы контроля качества молока и молочных продуктов с применением инфракрасной спектроскопии (ИК-спектроскопии). – (2010.)
3. Петько В. Г. и др. Анализ и оценка способов и устройств для определения жирности молока //Известия Оренбургского государственного аграрного университета. (2021. – №. 1 (87), С. 163-167.)
4. Кондаков Н.С., Зайцева А.Ю., Мазинг М.С. Контроль кислородного статуса тканей с использованием мультисенсорной оптической системы // Известия Российской Военно- медицинской академии. (2021 Т. 40, № S1-3, С. 147-151.)

СЕКЦИЯ 4

ХИМИЧЕСКИЕ ТЕХНОЛОГИИ

ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ СИНТЕЗА МОДИФИЦИРОВАННОГО ОКСИДА АЛЮМИНИЯ НА ЕГО ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

Акулов А.В.[1], Солодовникова П.А.[1]
[1)] Уральский Федеральный Университет имени Первого Президента России Б.Н. Ельцина, Физико-технологический институт
E-mail: supersashk@yandex.ru

INFLUENCE OF THE SYNTHESIS PARAMETERS OF MODIFIED ALUMINUM OXIDE ON ITS TECHNOLOGICAL PROPERTIES

Akulov A.V.[1], Solodovnikova P.A.[1]
[1)] Ural Federal University named after the First President of Russia B.N. Yeltsin, Institute of Physics and Technology

During the research work, the authors studied the influence of various synthesis parameters, such as the percentage of the modifier, the mechanism of its introduction and pH deposition on its technological parameters: viscosity, particle size, specific surface area and pore size.

Оксид алюминия широко используется в разных отраслях производственной деятельности. Одним из примеров является использование оксида алюминия в качестве носителя драгоценных металлов в составе автомобильных нейтрализаторных систем. Актуальным является разработка технологии для производства устойчивого отечественного гамма-оксида алюминия для производства автомобильных катализаторов.

Эксплуатация автомобильных катализаторов происходит в экстремальных для оксида алюминия условиях (>1000 ºС), что негативно сказывается на его технологических параметрах, поэтому важно исследовать образец после старения.

В ходе работы авторы изучили влияние различных параметров синтеза, таких как процентное содержание модификатора, механизм его введения и pH осаждения на его технологические параметры: вязкость, размер частиц, удельная поверхность и пористость.

Образцы были синтезированы методом контролируемого двухструйного осаждения из нитратного раствора при постоянном значении pH, равном 6, 7 или 8. Содержание модификатора варьировали в пределах от 1 до 3%. Также мы изучили влияния температуры обжига (650 ºС, 800 ºС, 900 ºС) на синтез оксида алюминия. Чтобы удостовериться в стабильности полученного образца, мы искусственно состаривали его при температурах эксплуатации внутри автомобильного катализатора (1000 ºС и 1100 ºС).

Было показано, что с увеличением pH раствора, увеличивается вязкость, уменьшается удельная поверхность, и при этом не изменяется размер пор.

1. Н.А. Пахомов; отв. ред. В.А. Садыков. Рос. акад. наук, Сиб. отд-ние, Ин-т катализа им. Г.К. Борескова. - Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2011
2. Дзисько В.А., Иванова А.С. Основные методы получения активного оксида алюминия. // Изв. СО АН СССР, Сер.хим. наук. 1985. М215, вып.5

SYNTHESIS OF MODIFIED PECTIN AND FURTHER DEVELOPMENT TO FORM MICRO-GEL PARTICLES USING 1,4-BIS(3-AMINOPROPYL)PIPERAZINE

Almudhhi I.YAMA[1], Kuzmin V.I[1], Mironov M.A[1]
[1)] Institute of Chemical Engineering, Ural Federal University
E-mail: iyama.alm@gmail.com

The experiment was made to attach amino ligands to pectin molecules while overcoming the problem of hydrolysis of pectin in water. After the successful synthesis, the modified pectin was cross-linked into micro-gel particles for further uses.

Pectin is an overly complex polysaccharide. For simplicity, it consists of galacturonic acid chain that is partially esterified as methyl esters and forming the pectin polymer that could have a molecular weight between 40,000 to 200,000. [1] The ester groups of pectin can react with primary amines to form amides. Furthermore, modified pectin could be cross-linked to develop micro-gel particles which are able to work as carriers of metal ions by further reactions. However, pectin molecule undergoes hydrolysis while dissolved in water and the degradation outcomes are pH dependent. [2]

To overcome the problem of pectin hydrolysis we have developed an original method for modification of pectin. The aim of the study was to successfully synthesis modified pectin with minimum water contact during amide formation with 1,4-Bis(3-aminopropyl)piperazine. Results obtained by NMR showed a successful substitution of 1,4-Bis(3-aminopropyl)piperazine with pectin while keeping the pectin molecules intact. As a result the water soluble pectin with a free amino groups was obtained which can be used to make stable micro-gels. A further reaction to cross-link pectin molecules to form micro-gel particles was made successfully resulted in stable solution under the desired pH level. This work and those results are the base for further development of micro-gel particles with abilities to perform catalytic reactions.

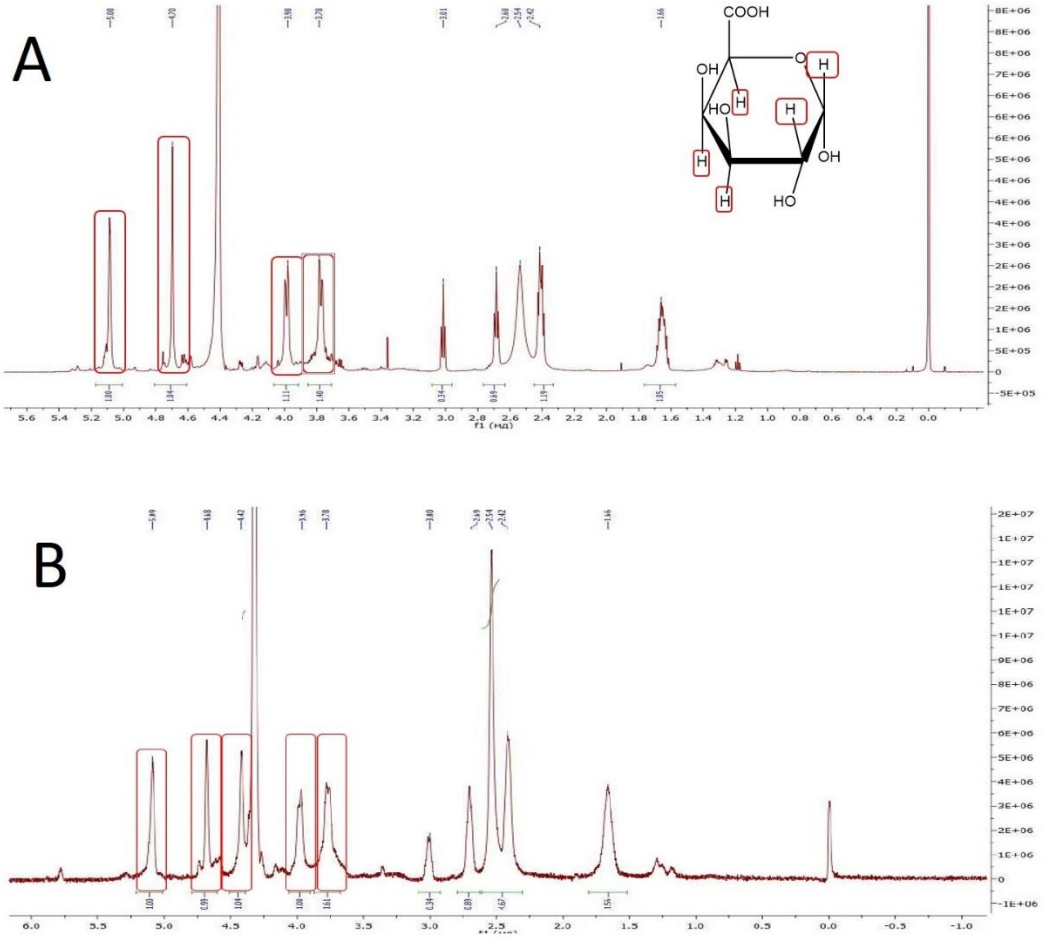


Рис. 1. NMR spectra of modified pectin showing the conversion of the starting material. A: 10 minutes reaction. B: 30 minutes reaction.

1. Henson, K. M., & Moeller, F. (2000). Pectin having reduced calcium sensitivity
2. Krall, S. M., & McFeeters, R. F. (1998). Pectin hydrolysis: effect of temperature, degree of methylation, ph, and calcium on hydrolysis rates. Journal of Agricultural and Food Chemistry, 46(4), 1311–1315.

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ПЛЕНОК PbS(Y) И PbS(Y,I)

Басалаев И.Д.[1], Селянина А. Д.[1], Маскаева Л.Н.[1, 2], Марков В.Ф.[1, 2]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия.
[2)] Уральский институт Государственной противопожарной службы МЧС России, г. Екатеринбург, Россия.
E-mail: ilyabasalaeff@yandex.ru

SYNTHESIS AND PROPERTIES OF LAYERS PbS(Y) AND PbS(Y,I)

Basalaev I.D.[1], Selyanina A.D.[1], Maskaeva L.N.[1, 2], Markov V.F.[1, 2]
[1)] Ural Federal University named after the First President of Russia B. N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia.
[2)] Ural Institute of State Fire Service of EMERCOM of Russia, Yekaterinburg, Russia.

Doping with rare earth elements of known materials, such as lead sulfide, to search for new materials, is one of the primary tasks of modern semiconductor materials science. In this work, PbS(Y) and PbS(Y,I) were obtained and their sensitivity to IR radiation was described.

Сульфид свинца – широко известный узкозонный полупроводник с шириной запрещенной зоны 0.41 эВ (для монокристалла). Этот полупроводниковый материал чувствителен к ближнему и среднему инфракрасному излучению, а также находит применение в опто- и наноэлектронике. Большой интерес представляет легирование полупроводников для придания им новых свойств, примером может служить легирование сульфида свинца редкоземельными элементами [1]. На данный момент в тематике легирования сульфида свинца редкоземельными элементами иттрий изучен наименее всего, а получение соответствующих пленок гидрохимическим методом ранее не описывалось.

Пленочные соединения были получены методом гидрохимического осаждения на ситалловые подложки. Реакционная смесь для PbS(Y) содержала: $Pb(CH_3COO)_2$, $Na_3C_6H_5O_7$, NH_4OH, N_2H_4CS, NH_4I и $Y(NO_3)_3$, который варьировали в относительных единицах от 10^{-3} до 1. Для осаждения пленок PbS(Y,I) смесь дополнительно содержала NH_4I.

Рост вольтовой чувствительности с увеличением содержания $Y(NO_3)_3$, наблюдаемый на рис. 1, наиболее выражен для пленок двойного легирования с получением слоев PbS(Y,I). С повышением концентрации соли иттрия в ванне растет количество дефектов в пленках, и как следствие, их фоточувствительность к ИК-излучению.

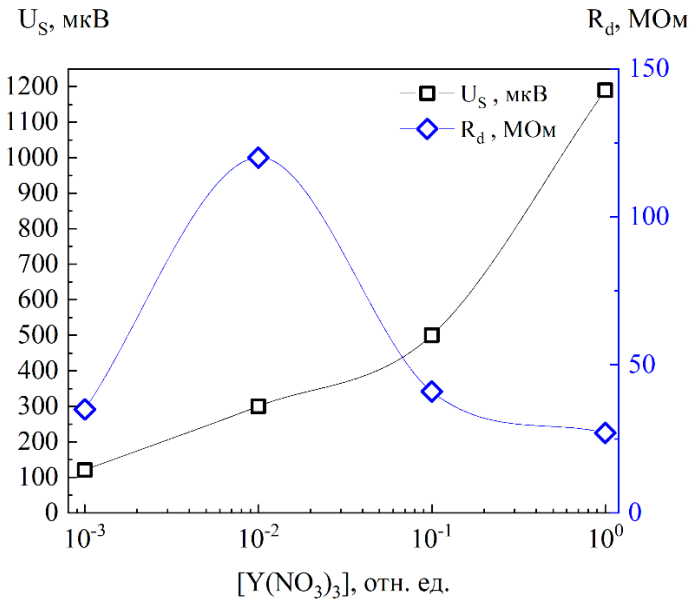


Рис. 1. Зависимости вольтовой чувствительности U_S и темнового сопротивления R_d от концентрации $[Y(NO_3)_3]$ в реакционной смеси.

Зависимость темнового сопротивления синтезированных слоев от концентрации соли иттрия имеет немонотонный характер с максимумом при $Y(NO_3)_3$ 0.01 отн.ед. Этот эффект можно объяснить включением в пленку оксидных и гидроксидных фаз иттрия при формировании полупроводникового слоя, которые значительно повышают темновое сопротивление сульфида свинца. Дальнейшее увеличение концентрации ионов иттрия в растворе приводит к формированию собственной фазы гидроксида иттрия в реакционной смеси, а не в составе пленки.

1. Chandekar K. V., Alshahrani T., Ben Gouider Trabelsi A., Alkallas F. H., Shkir Mohd., AlFaify S., Novel rare earth yttrium doping effect on physical properties of PbS nanostructures: facile synthesis and characterization, J. Mater. Sci., 56, 4763, (2021)

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЗНАЧЕНИЯ РН НА РАЗМЕР И ФОРМУ ЧАСТИЦ ЦИРКОНАТА ГАДОЛИНИЯ В ХОДЕ КОНТРОЛИРУЕМОГО ДВУХСТРУЙНОГО ОСАЖДЕНИЯ

Баженова Е.С.[1], Сазонов И.М.[1], Буйначев С.В.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: elizbag@mail.ru

INVESTIGATION OF THE INFLUENCE OF THE PH VALUE ON THE SIZE AND SHAPE OF GADOLINIUM ZIRCONATE PARTICLES BY CONTROLLED DOUBLE-JET PRECEPITATION

Bazhenova E.S.[1], Sazonov I.M.[1], Buinachev S.V.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The work is aimed at studying the effect of pH precipitation on the particle size of gadolinium zirconate. It was shown that the pH precipitation affects the properties of the obtained oxides.

В настоящее время повышенный интерес представляет разработка химически инертных тугоплавких материалов, способных работать при повышенных температурах. Одним из таких перспективных материалов является цирконат гадолиния, который представляет собой оксидную систему из диоксида циркония и оксида гадолиния. Цирконат гадолиния применяется в промышленности и ядерной энергетике благодаря таким свойствам, как высокая термическая, коррозионная и радиационная стойкость, низкая температура спекания и низкая теплопроводность [1]. Благодаря кубической пирохлоровой структуре, этот материал наиболее широко используют в качестве термобарьерных покрытий (ТБП). ТБП в основном изготавливают с помощью методов атмосферного плазменного напыления, поэтому для создания однородного покрытия очень важно, чтобы порошок имел гладкую сферическую форму. Целью работы является исследование влияния pH осаждения на размер и форму частиц циркоата гадолиния в ходе контролируемого двухструйного осаждения (КДО).

Образцы были синтезированы методом КДО. В качестве прекурсоров использовали растворы нитратов цирконила и гадолиния. Осаждение проводили в течение 100 минут при значениях pH = 6,5; 6,75; 7; 7,25 и 7,5. В качестве осадителя использовали 10 %-ый раствор аммиака. Перемешивание суспензии осуществляли при помощи верхнеприводной мешалки, скорость перемешивания составляла 300 об/мин. Свойства образцов исследовали при помощи метода лазерной дифракции на приборе ANALYSETTE 22. Далее образцы будут обозначены как «образец pH ...»

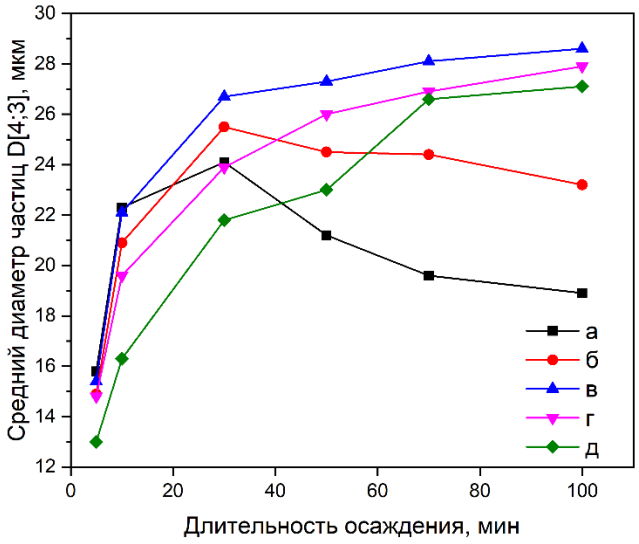


Рис. 1. Зависимость изменения среднего диаметра частиц от времени осаждения для образцов: а) pH 6,5; б) pH 6,75; в) pH 7; г) pH 7,25; д) pH 7,5

На рисунке 1 представлена зависимость среднего диаметра частиц от длительности осаждения.

Показано, что значение pH осаждения существенно влияет на размер частиц. Для образцов pH = 6,5 и 6,75 наблюдается резкое увеличение среднего диаметра частиц к 30-ой минуте, который составил 24 и 25 мкм соответственно. К 100-ой минуте происходит снижение среднего диаметра до 19 и 23 мкм соответственно. Для образцов pH = 7; 7,25 и 7,5 наблюдается постоянное увеличение диаметра частиц до 100-ой минуты. Финальный размер частиц для этих образцов составил 29, 28 и 27 мкм соответственно. Для всех образцов к концу осаждения наблюдается формирование частиц околосфероидальной формы с хорошо различимыми и сглаженными границами.

Таким образом, варьирование pH в ходе КДО позволяет получить сфероидальные частицы с различными размерами. При сравнении образцов показано, что образцы с наибольшим средним диаметром частиц получены при pH = 7; 7,25 и 7,5.

1. С. Ю. Саенко, В. А. Шкуропатенко, Р. В. Тарасов, К. В. Лобач, А. Е. Сурков, Л. М. Литвиненко, А. Г. Миронова / Высокоплотный керамический материал Gd2Zr2O7 со структурой пирохлора для экологически безопасной изоляции РАО (2015)

РАЗРАБОТКА МЕТОДА ОПРЕДЕЛЕНИЯ Sr-90 В ПРИРОДНЫХ ВОДАХ С НИЗКИМ ПРЕДЕЛОМ ОБНАРУЖЕНИЯ

Белоконова Н.В.[1], Воронина А.В.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, физико-технологический институт, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: nadyusha.ru2@gmail.com

DEVELOPMENT OF A METHOD TO DETERMINE Sr-90 IN NATURAL WATERS WITH A LOW DETECTION LIMIT

Belokonova N.V.[1], Voronina A.V.[1]
[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin Institute of Physics and Technology, Yekaterinburg, Russia

A method has been developed to determine Sr-90 in natural waters with a minimum detectable activity of 0.02 Bq/l. The method was tested during radioecological monitoring of natural waters in the territories of the Sverdlovsk and Chelyabinsk regions.

Испытания ядерного оружия, радиационные аварии и инциденты привели к глобальному и локальному загрязнению природных водоёмов радионуклидами. Для обеспечения радиационной безопасности населения необходим мониторинг техногенных радионуклидов в природных водах. Актуальной задачей для своевременного принятия мер является создание высокочувствительных методов с низким пределом обнаружения радионуклидов.

На кафедре радиохимии и прикладной экологии разработан метод определения Sr-90 в природных водах с минимально определяемой активностью 0,02 Бк/л. Для концентрирования стронция из природных вод использован карбонатсодержащий гидроксид циркония марки Т-3К производства АО «Неорганические сорбенты» [1]. Установлена зависимость выхода стронция в концентрат от соотношения объёма пробы и массы сорбента в колонке, скорости пропускания раствора, условий десорбции. Определены количества элюата в кювете на измерение и время измерения в зависимости от удельной активности Sr-90 в пробе, обеспечивающие требуемую погрешность измерения.

Проведена апробация метода при определении Sr-90 в природных водах на территории Свердловской и Челябинской областей, а также в пробах воды из контрольно-наблюдательных скважин ПХРО Свердловского отделения ФГУП «ФЭО». По результатам апробации 23 проб установлена зависимость выхода стронция от концентрации кальция в водных пробах и общей жёсткости воды. Показано, что выход стронция сохраняется постоянным до концентрации кальция ≤76 мг/л и общей жесткости воды ≤5.2 ммоль/л и составляет 81±2%. Для сокращения трудозатрат разработанный метод определения Sr-90 может быть использован для мониторинга без постоянного контроля выхода Sr-90 в

концентрат, а с использованием установленной зависимости выхода от концентрации кальция или жёсткости природных вод.

Результаты мониторинга показали, что из 23 проб наиболее загрязненными радионуклидом Sr-90 оказались пробы р. Теча и Нижне-Исетского пруда (г. Екатеринбург). Для вод р. Теча удельная активность Sr-90 (в равновесии с Y-90) составила 56±3 Бк/л, Нижне-Исетского пруда - 0,16±0,02. Во всех остальных исследованных пробах активность Sr-90 ниже и не превышает уровень вмешательства 4,9 Бк/л. Загрязнение р. Теча связано со сбросом в реку технологических стоков с ПО «Маяк» в 50-е годы, Нижне-Исетского пруда, предположительно, выпадениями после аварии на Чернобыльской АЭС. Для Нижне-Исетского пруда проведен сезонный мониторинг Sr-90 в водах.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и Правительства Свердловской области, проект 20-43-660055.

1. Voronina A.V., Belokonova N.V., Suetina A.K., Semenishchev V.S. Sorption of Sr-90 by a T-3K carbonate-containing zirconium dioxide. Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry. 331, p. 4021–4030 (2022)

ОПРЕДЕЛЕНИЕ БИОМАРКЕРОВ МЕТОДОМ «ОТПЕЧАТКОВ ПАЛЬЦЕВ» В ВУЛКАНИЧЕСКОЙ НЕФТИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ГХ-МС

Белоносова В.А.[1], Данилов Д.А.[1], Киселева Д.В.[2]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Институт геологии и геохимии им. академика А. Н. Заварицкого, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: bielonosova@gmail.com

DETERMINATION OF BIOMARKERS BY THE “FINGERPRINTS” METHOD IN VOLCANIC OIL BY THE GC-MS METHOD

Belonosova V.A.[1], Danilov D.A.[1], Kiseleva D.V.[2]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia
[2)] The Zavaritsky Institute of Geology and Geochemistry, Yekaterinburg, Russia

Determination of biomarkers by the “fingerprints” method in volcanic oil of the Kerch peninsula by the GC-MS method. Chromatogram analysis by characteristic mass fragments of biomarkers was performed.

Грязевые вулканы – геологическое образование, представляющее собой отверстие или углубление на поверхности Земли, из которого извергаются грязевые массы и газы, нередко смешанные с подземными водами и нефтью. Данный тип вулканов в основном встречается в нефтеносных регионах. С помощью их выбросов можно установить нефтегазовые месторождения глубокого залегания, которые в будущем могут стать добывающими территориями.

ГХ-МС применяется при анализе углеводородного состава нефтей и топлив, а именно для анализа минорных компонентов нефти, таких как ароматические и полициклические соединения, их производные и «биомаркеров» - вещества, свидетельствующие о происхождении нефти. При определении биомаркеров в нефти используют метод «отпечатков пальцев» - проведение идентификации нефти с помощью анализа масс-спектров по характерным осколочным ионам с определённым m/z для каждой группы биомаркеров.

В данной работе мы анализируем образцы, взятые из нефтяной реки Марьевка (мазут и глина), грязевых вулканов Борух-Оба (нефть), Костыринский (асфальт), Некпровский (глина, грязь). Отбирали 5 мл пробы и добавляли к ним 10 мл гексана. После отправляли на центрифугирование для разделения твердой и жидкой фазы. Из образовавшейся жидкой фазы отобрали 1 мкл шприцом и вводили хроматограф. Измерения проводили на ГХ-МС Clarus 600 (Perkin Elmer), на колонке Elite-5MS (L:30 m; ID 0,25; DF 0,25). Скорость потока гелия 1 мл/мин.

Полученные хроматограммы были рассмотрены по определенному осколочному иону биомаркеров, которые содержатся в нефти.

В результате исследования было выявлено, что во всех образцах наблюдается наибольшее содержание гопанов (m/z характерного осколочного иона 191), а также присутствуют стераны (m/z 217 и 218). Из этого следует, что месторождения не подверглись сильной биодеградации. Это позволяет определить источник исходного органического вещества для нефтесодержащих образцов.

1. Peters K.E., Walters C.C., Moldowan J.M. The Biomarker Guide (2nd ed.). Cambridge: Cambridge University Press, 2005.

ПРИМЕНЕНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЛЯ ОПТИМИЗАЦИИ ИСП-АЭС ОПРЕДЕЛЕНИЯ ГАЛЛИЯ В МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛАХ

Белозерова А.А.[1, 2], Майорова А.В.[1, 2], Бардина М.Н.[1, 2], Холманских И.А.[1, 2]
[1)] Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук
[2)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина
E-mail: aa_belozerova@mail.ru

APPLICATION OF THERMODYNAMIC MODELING TO OPTIMIZE ICP-AES DETERMINATION OF GALLIUM IN METALLURGICAL MATERIALS

Belozerova A.A.[1, 2], Mayorova A.V.[1, 2], Bardina M.N.[1, 2], Kholmanskikh I.A.[1, 2]
[1)] Institute of Metallurgy, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences
[2)] Ural Federal University named after the First President of Russia B. N. Yeltsin

The purpose of this work was to study the matrix spectral and non-spectral noise from macrocomponents on the intensity of the most sensitive spectral lines of gallium using TDM and experimentally verify the results obtained.

Атомно-эмиссионная спектрометрия с индуктивно связанной плазмой (ИСП-АЭС) является высоко чувствительным и экспрессным методом анализа. ИСП-АЭС широко используется для решения разнообразных задач при анализе рудного сырья, шламов, шлаков, металлургической продукции. ИСП-АЭС применятся для количественного определения содержания галлия в данных материалах [1]. Значительный вклад в погрешность результатов ИСП-АЭС определения галлия в металлургических материалах вносит стадия подготовки пробы к анализу, в первую очередь связанная с влиянием макрокомпонентов на аналитические спектральные линии галлия. Оптимизацию условий подготовки проб к ИСП-АЭС анализу можно, значительно сократив объем экспериментальных исследований, проводить с помощью термодинамического моделирования (ТДМ). Для этого используются программы расчета многокомпонентного высокотемпературного равновесия типа «HSC» и «Terra» [2]. Целью данной работы было с использованием ТДМ изучить матричные спектральные и неспектральные помехи от макрокомпонентов на интенсивность наиболее чувствительных спектральных линий галлия и экспериментально проверить полученные результаты.

По результатам ТДМ установлено, что зависимость интенсивностей наиболее чувствительных спектральных линий галлия от равновесной температуры плазмы имеет схожий вид и с повышением температуры до 8000 К происходит увеличение интенсивности. В низкотемпературной области плазмы

(4000–6000 К) наблюдаются матричные неспектральные помехи от Fe, Cr, Mo, W, Ni и Co, связанные с ионизационным смешением равновесия, при концентрации матричных элементов выше 20 мг/дм^3, что может мешать количественным определениям галлия при использовании режима аксиального наблюдения плазмы. Экспериментально подвержено, что хром оказывает наибольшее матричное влияние на линии галлия. Наименьшее спектральные наложения от Fe, Cr, Mo, W, Ni и Co наблюдаются на линиях Ga I 294.364, Ga I 403.298, Ga I 417.206 нм.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 23-23-00138).

1. Thangavel S., Dash K., Dhavile S.M., Sahayamn A.C. Determination of traces of As, B, Bi, Ga, Ge, P, Pb, Sb, Se, Si and Te in high-purity nickel using inductively coupled plasma-optical emission spectrometry (ICP-OES)// Talanta, V. 131, P. 505–509, (2015).
2. Майорова А.В., Печищева Н.В., Шуняев К.Ю., Бунаков А.В. // Аналитика и контроль, Т. 18, № 2, С. 136-149, (2014)..

ВЛИЯНИЕ ЛЕГИРУЮЩЕЙ ПРИМЕСИ ХРОМА НА МОРФОЛОГИЮ ХИМИЧЕСКИ ОСАЖДЕННЫХ ПЛЕНОК PbS

Бельцева А.В.[1], Поздин А.В.[1], Маскаева Л.Н.[1, 2]
[1)] Уральский Федеральный Университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина, Россия, Екатеринбург
[2)] Уральский институт ГПС МЧС России, Россия, Екатеринбург
E-mail: avbeltseva@mail.ru

THE EFFECT OF CHROMIUM DOPANT ON THE MORPHOLOGY OF CHEMICALLY DEPOSITED PbS FILMS

Beltseva A.V.[1], Pozdin A.V.[1], Maskaeva L.N.[1, 2]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia
[2)] Ural Institute of State Fire Service of EMERCOM of Russia, Yekaterinburg, Russia

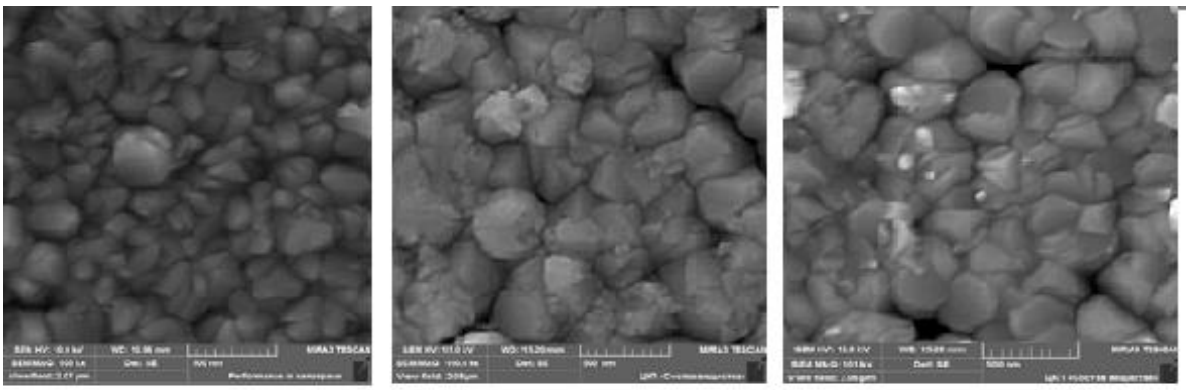
Thin chromium-doped PbS films with a thickness of 410 to 500 nm were obtained by chemical precipitation from aqueous media. A study of the surface morphology showed that chromium doping has a significant effect on the synthesis of PbS thin films.

Большинство исследователей проявляет большой интерес к изучению легирования тонких пленок переходными элементами. Одним из наиболее распространённых для легирования материалов является сульфид свинца (PbS). PbS – полупроводниковый материал группы $A^{IV}B^{VI}$, который нашел широкое применение во многих областях науки и техники [1]. Введение ионов $Cr^{3}+$ в реакционную смесь в процессе химического осаждения тонких пленок PbS, как отмечалось в работе [2], оказывает влияние на фотоэлектрические свойства полученных тонкопленочных слоев. Нанопленки PbS, легированные 2 ат.% Cr, показали наилучшие оптические и электрические свойства, подходящие для применения в солнечных элементах [3].

Поэтому в настоящей работе, являющейся продолжением исследований по гидрохимическому осаждению пленок сульфидов металлов, рассмотрено влияние одного из элементов переходной группы – хрома, на морфологию химически осажденных пленок сульфида свинца.

Гидрохимический синтез пленок PbS:Cr осуществляли на предварительно обезжиренные стеклянные подложки из цитратно-аммиачной ванны, состоящей из 0.04 М ацетата свинца, 4.0 М водного раствора аммиака, 0.3 М цитрата натрия и 0.6 М тиомочевины, в термостате марки LOIP LT−112a при 353 K в течение 90 минут. Концентрацию легирующей добавки в виде соли хлорида хрома $CrCl_3$, вводимой в реакционную смесь, изменяли от 0 до 0.02 М. Толщина пленок, оцененная с помощью интерферометра Линника МИИ–4М, составила 410-500 нм.

Электронно-микроскопическими исследованиями пленок PbS, полученных из реакционных смесей, содержащих в своем составе соль хрома (III), установлено, что слои имеют различную архитектуру, которая меняется в зависимости от количества легирующей добавки. Это наглядно видно на микрофотографиях, приведенных на рис. Поверхность нелегированного сульфида свинца (рис. 1а) характеризуется плотной однородной структурой и состоит из зерен размером от 30 до 200 нм. Добавка соли хрома в реакционную смесь приводит к изменению формы и укрупнению зерен, а также появлению вторичного зародышеобразования на поверхности формируемых пленок PbS (рис. 1 б, в).



а *б* *в*

Рис. 1. Микрофотография пленок PbS (а) и PbS, синтезированных из реакционных смесей, содержащих $CrCl_3$, моль/л: 0.004 М (б) и 0.02 (в)

Дальнейшие исследования тонкопленочных слоев PbS:Cr позволят, варьируя их структурно-морфологические характеристики, изменить полупроводниковые и функциональные свойства, следовательно, расширить область их применения.

1. Taipeng L. , Tang X., Menglu Chen. Materials Coatings. V.12. №5. P.609. (2022)
2. Ahmed A. M., RabiaM., Shaban M. RSC Adv. V.10. P.14458-14470. (2020).
3. Huo J., Li W., Wang T. Coatings. V.9.№6.P.376. (2019)

ЭЛЕКТРОДНЫЕ ПОТЕНЦИАЛЫ СЕРЕБРА В ЭВТЕКТИЧЕСКОМ РАСПЛАВЕ NaCl–KCl

Бессонова Д.А.[1], Иванов А.Б.[1], Волкович В.А.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: chuvasch@yandex.ru

ELECTRODE POTENTIALS OF SILVER IN NaCl–KCl EUTECTIC MELT

Bessonova D.A.[1], Ivanov A.B.[1], Volkovich V.A.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The electromotive force measurements method was applied for determining electrode potentials of silver in the ternary NaCl–KCl eutectic mixture–based melts at 823–1180 K.

В рассмотренных ранее работах [1–4] было представлено влияние температуры на формальный потенциал серебра в таких хлоридных расплавах как LiCl–KCl и NaCl–KCl–CsCl.

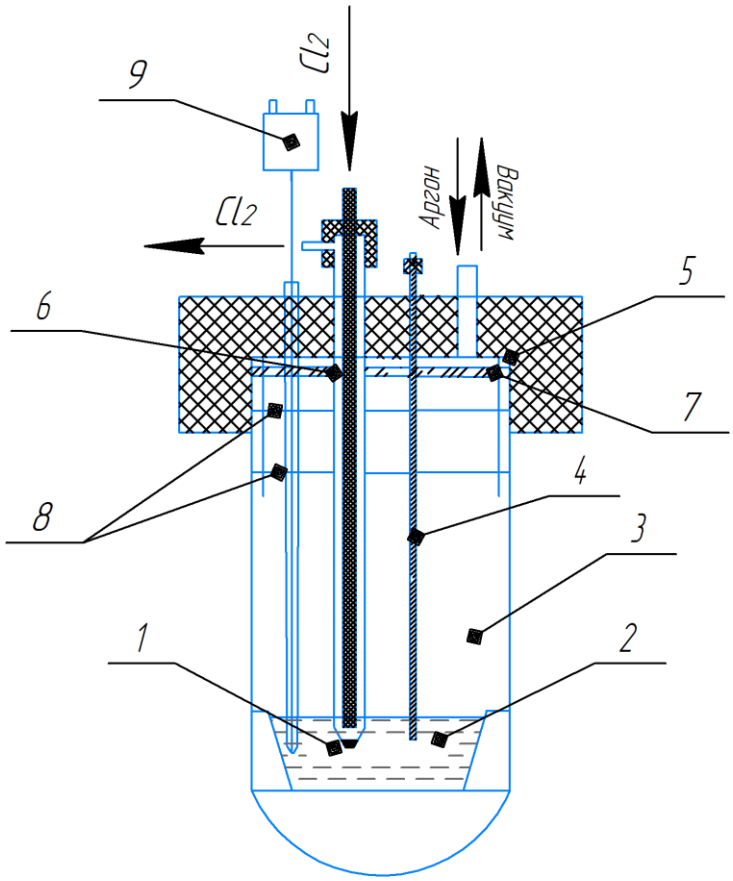
В ходе данной работы были определены электродные потенциалы серебра в расплавах на основе двойной эвтектической смеси NaCl–KCl (30–24.5 мол. %). Измерения выполняли с методом потенциометрии нулевого тока с использованием гальванического элемента, состоящего из хлорного и серебряного электродов:

Ag|(NaCl–KCl) + AgCl||(NaCl–KCl)|Cl2, графит (1)

ЭДС гальванического элемента определяли в интервале температур от 823 до 1180 К с шагом 323 К. Концентрацию серебра в расплаве варьировали от 0.4 до 4.0 мас. %. Для измерений использовали потенциостат–гальваностат AUTOLAB PGSTAT 12/30/302.

Электролит, представляющий собой двойную эвтектическую смесь NaCl–KCl (30–24.5 мол. %), находился в тигле из стеклоуглерода. Методика подготовки исходных солей описана ранее [5]. Тигель с электролитом находился в кварцевой ячейке, заполненной высокочистым аргоном (марки ВЧ, чистотой 99.998%). В качестве серебряного электрода использовалась серебряная проволока, опущенная в тигель с расплавом.

Для фиксации температуры во время эксперимента в рабочий расплав была опущена хромель–алюмелевая термопара в кварцевом чехле. Принципиальный вид экспериментальной ячейки для проведения электрохимических измерений представлен на рисунке 1.



1 – исследуемый расплав; 2 – тигель из стеклоуглерода; 3 – кварцевая ячейка; 4 – Ag электрод на молибденовом токоподводе; 5 – резиновая пробка; 6 – хлорный электрод; 7 – защитный экран из фторопласта; 8 – защитные экраны из Ni; 9 – термопара в кварцевом чехле. Рис. 1. Ячейка для проведения измерений

В результате экспериментов был построен график зависимости температуры от потенциала серебра.

1. Mingyang Zhang, Jianbang Ge, Jinsuo Zhang, Li Emily Liu. Redox potential measurement of AgCl in molten LiCl–KCl salt using chronopotentiometry and potentiodynamic scan techniques. – J. Electrochem. Com., 2019, 106, p. 55–60.
2. A.C.Gruner and W.T.Thompson. The activity of AgCl in AgCl–LiCl–KCl. – Can. J. Chem., 1975, 53, p. 1084–1092.
3. V.A.Volkovich, A.B.Ivanov, D.Bessonova and D.S.Maltsev. Silver Electrode Potentials in NaCl–KCl–CsCl Eutectic Melts.
4. Z.Moser, K.Rzyman. Thermodinamic studies on liquid AgCl/KCl/LiCl solutions. Electronchim. Acta, 1980, 25, p.183–187.
5. Волкович В.А., Данилов Д.А., Васин Б.Д., Хохряков А.А. Спектроскопическое исследование рения в расплавах галогенидов щелочных металлов. – Расплавы, 2006, No 4, с. 21–28.

OPTIMISATION OF EXTRACTION METHODS OF CHLORELLA GROWTH FACTOR FROM CHLORELLA VULGARIS AS A POTENTIAL NANOPARTICLE MATERIAL

Bulya Torkwase Emmanuella[1], Mironov M.A[1]
[1)] Department of Technology for Organic Synthesis, Institute of Chemical Engineering, Ural Federal University, Mira 19, 620002, Ekaterinburg, Russia
E-mail: tbulia@urfu.ru

The aim of this research is to obtain a suitable chlorella growth factor which is a protein found majorly in Chlorella vulgaris. Hence, the extraction of different protein extracts from Chlorella vulgaris was carried out using enzyme, water, citric acid, and sodium hydroxide for comparative study.

Abstract

Chlorella species are rotund part from the phylum Chlorophyta (green algae) that have additionally gained acceptance to be as a food supplement lately. Chlorella vulgaris is the utmost taken advantage of the as one of the microalgae species being used in industry because of its high protein content ranging from 51%–58% dry weight (dw) and ideal fundamental amino acid composition [1].Chlorella additionally contains numerous other advantageous supplements, including β-1,3-glucan, vitamins (B-complex and ascorbic acid composition), minerals (potassium, sodium, magnesium, iron, and calcium), β-carotene, chlorophyll, and Chlorella growth factor (CGF) [2].

Nanoparticles can be synthesized by several methods, including mechanical and chemical processes. These methods, while effective in producing various types of metal nanoparticles, have environmental and health limitations [3]. The biosynthesis of nanoparticles using microorganisms, enzymes and plant extracts has become a clean, economical, and efficient alternative to chemical methods. In essence, the biosynthesis of metal nanoparticles by plants especially microalgae have a high potential for commercialization [4]. Chlorella vulgaris a green microalgae have a possibility of being used as a nanocarrier in food industries. However, obtaining homogeneous Nano sized preparations with a certain size, shape, and physicochemical properties is of huge significance in the development of new drug delivery systems [5].

The aim of this research is to obtain a suitable chlorella growth factor which is a protein found majorly in Chlorella vulgaris. Hence, the extraction of different protein extracts from Chlorella vulgaris was carried out using enzyme, water, citric acid, and sodium hydroxide subjected to the same conditions of temperature, pressure, and time. The comparison study of extraction methods has often given a clear result on the efficient protein production and other bioactive compounds that can be obtained in chlorella vulgaris. It is necessary to carry out a comparative study of chlorella extracts. Considering the data obtained from the chlorella growth factor extracts there were variations in the percentage yield and protein content. The yield from 0.1% sodium hydroxide was 6.93% and protein content was 36.35%, extract from 0.02% sodium

hydroxide had a yield of 6.23% and 23% protein, while the yield from water and citric acid extraction were 4.83% and 3.69% respectively, but they had the same protein content (11%). Although, the highest yield (13%) was obtained from the extraction done with enzyme trypsin however it had the least protein content (9%). The comparison of these extracts was done by analysing the physiochemical properties of the extracts in order to identify and separate the positively charged protein from the negatively charged protein Chlorella extract. 0.1% sodium hydroxide had the highest protein content that can be used for nanoparticles formation with fucoidan.

I express my appreciation and gratitude to my scientific adviser, Professor Mironov M.A. for his guidance and contributions to my research work.

Thanks to Professor Elena G. Kovaleva for assisting with the main raw material used in this study.

.

1. Becker, E.(2007). Micro-algae as a source of protein. Biotechnol. Adv., Vol. 25, P. 207– 6. Belhocine, T. et al. (2006). 18FDG PET in oncology: the best and the worst (Review). Int. J. Oncol. Vol. 28, P. 1249–1261
2. Rodriguez-Garcia, I.; Guil-Guerrero, J.L.(2008). Evaluation of the antioxidant activity of three microalgal species for use as dietary supplements and in the preservation of foods. Food Chem., Vol. 108, P. 1023–1026
3. Edison TJI, Sethuraman MG. Instant green synthesis of silver nanoparticles using Terminalia chebula fruit extract and evaluation of their catalytic activity on reduction of methylene blue. Process Biochem 2012; 47(9): 1351– 1357. [Google Scholar]
4. Ahmed S, Ahmad M, Swami BL, Ikram S. A review on plants extract mediated synthesis of silver nanoparticles for antimicrobial applications: a green expertise. J Adv Res 2016; 7(1): 17– 28
5. Prabha G, Raj V. Formation, and characterization of β-cyclodextrin (β-CD)-polyethyleneglycol (PEG)-polyethyleneimine (PEI) coated Fe3O4 nanoparticles for loading and releasing 5-Fluorouracil drug. Biomed Pharmacother 2016; 80: 173– 182.

СИНТЕЗ ЦИРКОНАТА ГАДОЛИНИЯ МЕТОДОМ КОНТРОЛИРУЕМОГО ДВУХСТРУЙНОГО ОСАЖДЕНИЯ ПРИ ПОСТОЯННОМ ЗНАЧЕНИИ PH

Буйначев С.В.[1], Баженова Е.С.[1], Сазонов И.М.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
E-mail: s.v.buinachev@urfu.ru

SYNTHESIS OF GADOLINIUM ZIRCONATE BY CONTROLLED DOUBLE-JET PRECIPITATION AT A CONSTANT PH

Buinachev S.V.[1], Bazhenova E.S.[1], Sazonov I.M.[1]
[1)] Ural Federal University named after the First President of Russia B. N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia

In this work, the synthesis of gadolinium zirconate was carried out by the controlled precipitation method at a constant pH value. It was shown that the concentration of the components and the pH value had a significant effect on the particle size.

Оксидные материалы на основе цирконатов редкоземельных элементов находят широкое применение в различных отраслях промышленности. Так, такие материалы используются для создания термобарьерных покрытий, кислород проводящих твердых электролитов, а также для иммобилизации ядерных отходов [1]. На сегодняшний день цирконаты РЗЭ получают преимущественно методом обратного осаждения гидроксидов циркония и РЗЭ с последующей термообработкой [2]. Зачастую, полученные порошки измельчают в шаровой мельнице с последующей грануляцией методом распылительной сушки с получением сфероидальных частиц [3]. Гранулирование порошков цирконатов РЗЭ необходимо для создания термобарьерных покрытий методом атмосферного плазменного напыления. Такой способ формирования порошков сложен, многостадиен и дорогостоящий. Таким образом, поиск новых подходов для синтеза цирконатов РЗЭ является актуальной задачей. В работе был синтезирован цирконат гадолиния со сфероидальной формой частиц методом контролируемого осаждения при постоянном значении pH.

Цирконат гадолиния был получен путем контролируемого осаждения при постоянном значении pH. Для этого смесь растворов нитратов циркония и гадолиния дозировали в емкость с постоянной скоростью равной 5 мл/мин. Параллельно, контролируемо дозировали раствор аммиака для поддержания постоянного значения pH. Процесс осаждения проводили в течение 50 минут при постоянном перемешивании суспензии. В ходе осаждения производили отбор проб суспензии для анализа размера и формы частиц. В работе было исследовано

влияние суммарной концентрации циркония и гадолиния в общем растворе и значение pH осаждения на изменение среднего диаметра частиц.

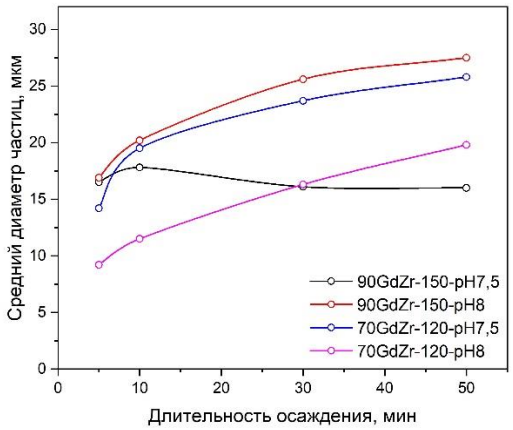


Рис. 1. Изменение среднего диаметра частиц в зависимости от концентрации компонентов и значения pH

На рисунке 1 представлено изменение среднего диаметра частиц в зависимости от концентрации компонентов в растворе и значения pH процесса осаждения. В работе были синтезированы образцы при значениях pH=7,5 и 8. Концентрации циркония и гадолиния (в пересчете на оксид) составляли 50 и 70 г/л для одной серии и 60 и 90 г/л для другой серии соответственно. Показано, что и суммарная концентрация компонентов, и значение pH процесса осаждения оказывают значительное влияние на средний диаметр частиц. Только для образца 90GdZr-150-pH7,5 характерно снижение среднего диаметра начиная с 10 минуты осаждения, который к концу осаждения составил 16 мкм. Для остальных образцов характерно постоянное увеличение среднего диаметра частиц. Так, для образцов 70GdZr-120-pH7,5 и 90GdZr-150-pH8 средний диаметр частиц к концу осаждения находится в районе 26 мкм. В тоже время, для всех образцов характерно формирование частиц со сфероидальной формой. Для всех образцов степень соосаждения гадолиния близка к 100%, для полного осаждения гадолиния необходимо увеличить значение pH при помощи добавления раствора аммиака. Таким образом, методом осаждения при постоянном значении pH возможно получение цирконата гадолиния с различным размером частиц и сфероидальной формой, которые могут быть использованы для создания термобарьерных покрытий.

1. Kun Y., Yachun W., Penghui L., Tiankai Y., Dong Z., Jie L., Journal of the European Ceramic Society, vol. 41, pp. 6018-6028, 2021
2. Kalinkin A.M., Vinogradov V.Yu., Kalinkina E.V., Nevedomskii V.N., Chemical Papers, Vol. 74, pp. 1161-1170, 2020
3. Shan L., Wenting H., Jia S., Liangliang W., Jian H., Hongbo G., Surface and Coatings Technology, vol. 383, pp. 125243, 2020

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА ЦИРКОНА МЕТОДОМ РЕНТГЕНОФЛУОРЕСЦЕНТНОГО АНАЛИЗА

Чекунова А.А.[1], Абрамов А.В.[1], Шаденко И.П.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: Anita.Che@mail.ru

DETERMINATION OF THE CHEMICAL COMPOSITION OF ZIRCON BY XRF

Chekunova A.A[1], Abramov A.V.[1], Shadenko I.P.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

A technique was developed for determining the chemical composition of zircon by X-ray fluorescence analysis. A quantitative analysis was carried out Zr, Si, Al, Ti, Fe, Cr, Mg, Cl, Ca, K, It. Optimal analysis conditions are selected and metrological parameters are estimated.

Чистый циркон обладает высокой химической и механической устойчивостью, благодаря чему применяется в производстве огнестойких и огнеупорных материалов, керамических изделий.

Для реализации технологии получения огнеупоров требуется разработка методики анализа химического состава циркона. Для реализации данной методики предложено использовать метод рентгеноспектральной флуоресцентной спектрометрии. Это высокоточный быстрый метод, позволяющий эффективно определять макро- и микрокомпоненты в порошках, монолитах и прессованных пробах. Для достижения универсальности методики циркон требуется прокалить для перевода карбонатных и иных фаз в оксидные и избавления от легколетучих веществ, после чего измельчить порошок для достижения требуемой однородности и гомогенизации пробы. В связи с этим отработаны процедуры прокалки и измельчения образцов. Пробоподготовка проводилась методом высокотемпературного растворения. Оптимальные параметры для растворения проб подобраны опытным путем. В качестве аналитов заданы следующие элементы Zr, Si, Al, Ti, Fe, Cr, Mg, Cl, Ca, K, It. Количественный химический анализ требует наличия стандартных образцов (СО). Разработка СО осуществлялась методом высокотемпературного растворения смесей индивидуальных веществ. Смеси готовили смешиванием индивидуальных соединений, содержащих аналиты, с дальнейшей гомогенизацией и установлением содержаний и их погрешностей. Приготовлено десять СО, охватывающих широкий диапазон концентраций аналитов. Анализ реализован способом внешнего стандарта. Для каждого аналита подобраны оптимальные условия возбуждения аналитических линий. Оценены метрологические характеристики методики

1. Добрецов Н. Л., Чепуров А. И., Сонин В. М., Жимулев Е. И., Геология и геофизика, т.60, (2019), с. 527-531
2. Усов П. Г., Соломатина Э.П., Известия Томского политехнического института, т.238, (1976), с. 115-119

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ДОБАВКИ ИТТРИЯ НА ПРОЦЕСС ОСАЖДЕНИЯ ГИДРОКСИДА ЦИРКОНИЯ В ХОДЕ КОНТРОЛИРУЕМОГО ДВУХСТРУЙНОГО ОСАЖДЕНИЯ

Домашенков М.А.[1], Буйначев С.В.[1], Машковцев М.А.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: maks84155@gmail.com

INVESTIGATION THE EFFECT OF YTTRIUM ADDITIVE ON THE PRECIPITATION OF ZIRCONIUM HYDROXIDE DURING CONTROLLED TWO-JET DEPOSITION

Domashenkov M.A.[1], Buinachev S.V.[1], Mashkovtsev M.A.[1]
[1)] Ural Federal University named after the First President of Russia B.N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia

Abstract: To study the effect of the addition of yttrium to zirconium hydroxide on the granulometric composition of precipitation obtained during controlled precipitation. It is shown that the addition of yttrium up to 15 wt. % leads to an increase in the particle size of zirconium hydroxide during.

Стабилизированный диоксид циркония применяется во многих областях промышленности для создания термобарьерных покрытий, керамических изделий в медицине, электролитов твердооксидных электрохимических устройств. Распространенными способами получения стабилизированного диоксида циркония являются методы прямого и обратного осаждения гидроксидов циркония и стабилизирующего компонента. Основной недостаток этих способов – это отсутствие возможности управлениями свойствами осадков. Известно, что свойства осадков гидроксидов металлов сильно зависят от pH процесса осаждения [1]. Цель работы – исследование влияния добавки иттрия на процесс осаждения гидроксида циркония в ходе контролируемого двухструйного осаждения (КДО).

Осаждение гидроксида циркония проводили методом КДО при постоянном значении pH равном 5 при использовании в качестве прекурсора общего раствора нитратов иттрия и циркония и водного раствора аммиака в качестве основания. Добавка иттрия составляла 0, 2, 4, 7, 15 и 30 массовых процента от суммы оксидов, образцы обозначены 0%Y, 2%Y, 4%Y, 7%Y, 15%Y, 30%Y соответственно. В ходе осаждения исследовали гранулометрический состав осадков, форму частиц, а также степень соосаждения иттрия методы лазерной дифракции, оптической микроскопии и титриметрический анализ соответственно.

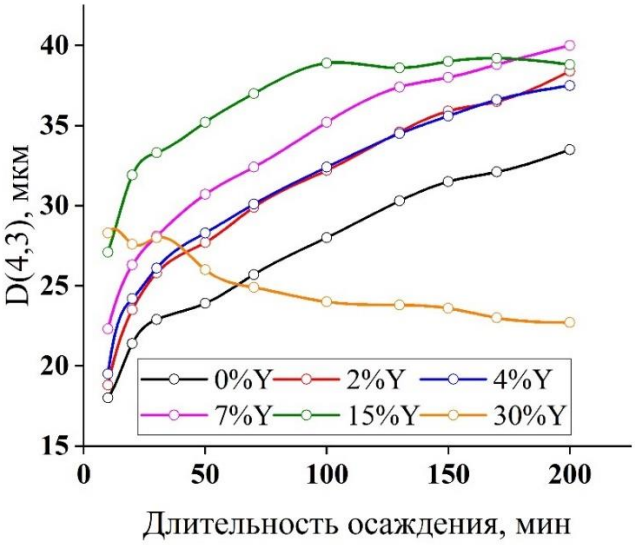


Рис. 1. Изменение среднего диаметра частиц от длительности осаждения и массовой доли иттрия

На рисунке 1 представлено изменение среднего диаметра частиц в ходе осаждения при различном содержании иттрия. Все образцы к концу осаждения имеют близкую к сфероидальной форму частиц. Средний диаметр частиц образца без иттрия на протяжении всего осаждения постоянно увеличивается и достигает 33,5 мкм, при этом дисперсия размеров постоянно снижается до 1,08. При добавлении иттрия вплоть до 15 мас. % размер частиц осадков значимо увеличивается в сравнении с образцом без иттрия и к концу осаждения достигает значения 40 мкм. Дисперсия размеров с добавкой иттрия в целом увеличивается, при этом добавление иттрия приводит к сглаживанию поверхности частиц. Несмотря на низкое значение pH осаждения, степень захвата иттрия осадком для этих образцов находится в интервале от 72 до 80%. Увеличение содержания иттрия до 30 мас. % приводит к тому, что в ходе осаждения диаметр частиц осадка постоянно снижается вплоть до 22,7 мкм, дисперсия размеров при этом составляет 1,3, а степень захвата иттрия снижается до 59%.

Постоянное увеличение среднего диаметра частиц в ходе осаждения у образца без иттрия может быть связано с процессом агрегирования частиц гидроксида циркония по электростатическому механизму [2]. При добавке иттрия до 15 мас. % улучшается процесс агрегации, вероятно из-за изменений поверхностных свойств частиц гидроксида циркония. Увеличение до 30 мас. % иттрия приводит к снижению среднего диаметра частиц, вероятно за счет образования частиц гидроксида иттрия в месте подачи аммиака в следствии высокой концентрации иттрия в растворе.

1. Sergei Buinachev, Maksim Alekseevich Mashkovtsev, Nina Zhirenkina, Danil Aleshin, Anna Dankova//A new approach for the synthesis of monodisperse zirconia powders with controlled particle size // Hydrogen Energy 46 // 16878 – 16887 с. 2021;
2. Sergei Buinachev, Maksim Mashkovtsev, Anna Dankova, Nina Zhirenkina, Ksenia Kharisova//Synthesis of YSZ powders with controlled properties by the CDJP method// Powder Technology 399 // 117201 с. 2022.

СЕНСОРНЫЕ СВОЙСТВА ТОНКИХ ПЛЁНОК В СИСТЕМЕ CdS - PbS

Селянина А.Д.[1], Дёмина Д.А.[1], Маскаева Л.Н.[2], Марков В.Ф.[2]
[1)] Уральский Федеральный Университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина, Россия, Екатеринбург
[2)] Уральский институт ГПС МЧС России, Россия, Екатеринбург
E-mail: dyominadar@mail.ru

SENSORY PROPERTIES OF THIN FILMS IN THE CdS - PbS SYSTEM

Selyanina A.D.[1], Dyomina D.A.[1], Maskaeva L.N.[2], Markov V.F.[2]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia
[2)] Ural Institute of State Fire Service of EMERCOM of Russia, Yekaterinburg, Russia

The search for new materials for environmental monitoring is one of the primary tasks of modern sensorics. In this work, the sensitivity of three-component compounds in the CdS-PbS system to ammonia (up to 10 ppm) at room temperature was found.

В современном мире поиск новых материалов для мониторинга окружающей среды, в частности определения содержания весьма токсичного газообразного аммиака, источником которого в атмосфере являются производство удобрений, применение соединений, содержащих аммиак, в строительстве, лесные и степные пожары и т.д. В качестве чувствительных материалов для контроля аммиака в воздухе традиционно используются оксиды металлов, требующие высоких температур (≥ 500 - 900K). Недавно исследователи успешно применили, обладающие активными адсорбционными центрами, нанопорошки PbS [1] и тонкопленочные слои CdS [2] в качестве перспективных кандидатов для изготовления газовых сенсоров на аммиак. Однако и для таких сенсорных элементов требуется подогрев до температуры в диапазоне 100–300° С, что относится к существенным недостаткам датчиков. Можно полагать, что формирование пленочных соединений на основе различных кристаллических структур B3 или B4 (CdS) и B1 (PbS) гидрохимическим осаждением, протекающим в неравновесных условиях с участием коллоидной стадии, способствует проявлению размерных эффектов, обеспечивающих формирование развитой микроструктуры, а также появлению динамических (искажения решетки) и статических (вакансии, дислокации, границы кристалла, микротрещины, поры) дефектов, что позволит создать чувствительные при комнатной температуре (25° С) к аммиаку сенсорные элементы.

Нами гидрохимическим осаждением из реакционной смеси, содержащей фиксированные концентрации водных растворов $PbAc_2$, Na_3Cit, NH_4OH и N_2H_4CS при варьировании от 0.01 до 0.1 моль/л $CdCl_2$, получены тонкопленочные соединения в системе CdS-PbS. Процесс осаждения проводили на ситалловые

подложки при температуре 353 K в течение 120 мин. Далее были изготовлены сенсорные элементы с чувствительной площадкой 5 × 7 мм. Сенсорные свойства обсуждаемых пленок по отношению к газообразному аммиаку исследовали в специально изготовленной герметичной ячейке, в которой с помощью прижимных контактов устанавливали сенсорный элемент и подавали газовоздушную смесь, содержащую 500 ppm (311,13 мг/м^3) аммиака.

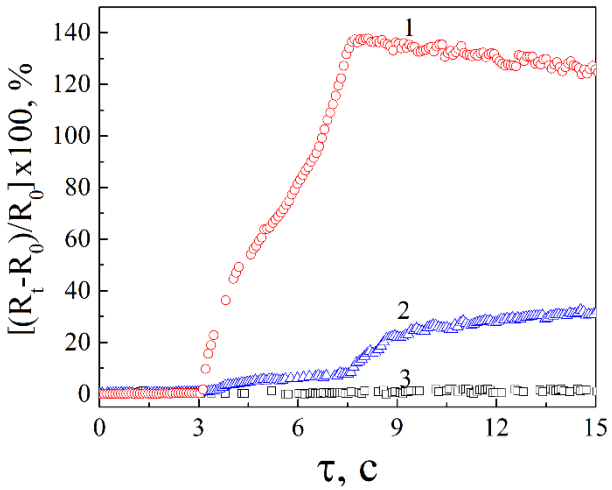


Рис. 1. Кинетические зависимости изменения отклика сенсорных элементов на основе плёнок CdS-PbS, полученных из реакционной смести, содержащей CdCl2, моль/л: 0.08 (1); 0.10 (2); 0.06 (3).

На рис. 1 приведены кинетические зависимости изменения отклика [(R_τ-R_0)/R_0)] *100 % сенсорных элементов на основе синтезированных плёнок (R_0 и R_τ – сопротивление до и после контакта с аммиаком). Максимальное значение отклика (140%) получено у плёнок, полученных в ванне с 0.08 моль/л $CdCl_2$. Минимально возможная обнаруживаемая концентрация аммиака в объеме ячейки составила 10 ppm (6.22 мг/м^3). Омическое сопротивление сенсорных элементов после извлечения из измеряемой среды на воздух возвращается к своему исходному значению R_0 при комнатной температуре в течение 20-40 минут.

1. T. Fu, Research on gas-sensing properties of lead sulfide-based sensor for detection of NO2 and NH3 at room temperature. Sensors and Actuators B: Chemical. 2009. Vol.140. P.116-121.
2. S. Saravanakumar, K.S. Usha, G. Vijaya Prasath, Ammonia gas sensing performance of Co/Ni co-doped CdS thin films by chemical bath deposition, Journal of Materials Science: Materials in Electronics. 2023. Vol.34.

ИССЛЕДОВАНИЕ СОРБЦИОННЫХ СВОЙСТВ BI-207 НА ТОНКОСЛОЙНЫХ НЕОРГАНИЧЕСКИХ СОРБЕНТАХ НА ОСНОВЕ СУЛЬФИДА КАДМИЯ

Ермолаева В.Д.[1], Семенищев В.С.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
E-mail: Lera4kaae@yandex.ru

RESEARCH OF SORPTION PROPERTIES OF BI-207 ON THIN-LAYER INORGANIC SORBENTS BASED ON CADMIUM SULFIDE

Ermolaeva V.D.[1], Semenishchev V.S.[1]
[1)] Ural Federal University named after the First President of Russia B.N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia

Lead-210 has a high dose coefficient, so its extraction and modification becomes important. The measurement is carried out indirectly through the daughter radionuclide Bi-210, therefore, the kinetics of sorption of Bi-207 with similar chemical properties was studied.

Согласно п. 5.3.5 НРБ-99/2009 [1] при превышении суммарной альфа бета-активности Pb-210 является одним из приоритетных радионуклидов, значение дозового коэффициента которого составляет 6,9–4 мЗв/Бк. Несмотря на низкую энергию бета-излучения, Pb-210 вносит существенный вклад в дозу, получаемую человеком, в первую очередь за счет высокоэнергичных дочерних альфа- и бета-излучателей Po-210 и Bi-210. Pb-210 является мягким бета-излучателем, который регистрируется бета-радиометрами с низкой эффективностью, поэтому наиболее часто радиометрическое измерение производится по его дочернему короткоживущему изотопу Bi-210.

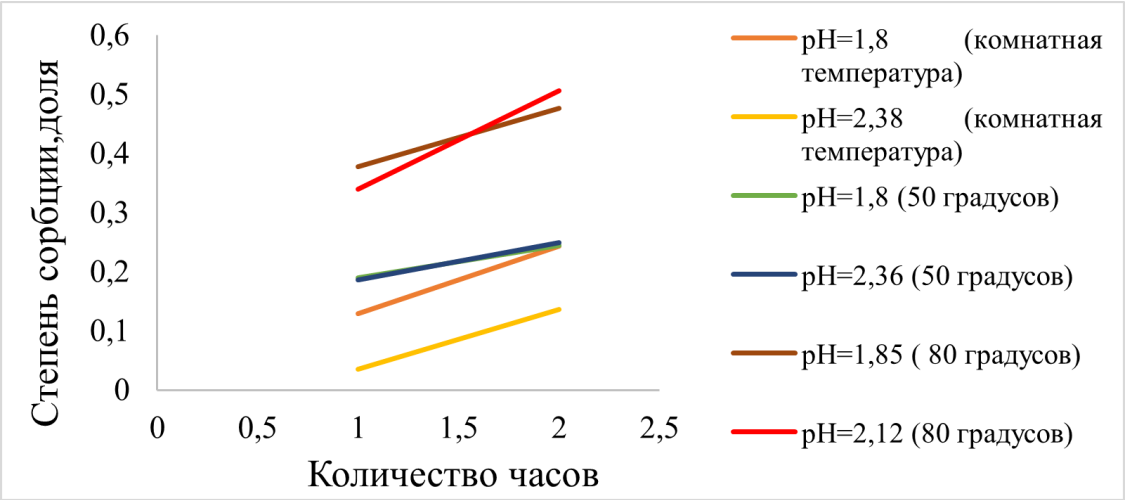


Рис.1. Зависимости степеней сорбции Bi-207 на ТНС CdS-ПЭ от времени при комнатной температуре, 50º и 80º

У радионуклида Bi-210 (T½=5 дней) небольшой период полураспада, поэтому, в связи с тем, что химические свойства изотопов идентичны, была изучена сорбция Bi-207 (T½=32,9 лет). Прошлые результаты показали, что при комнатной температуре степень сорбции Bi-207, стремящаяся к единице, наблюдается по истечении 32 дней, что не удовлетворяет нашим требованиям периода полураспада Bi-210. Для этого была изучена сорбция Bi- 207 на ТНС CdS-ПЭ в зависимости от изменения температуры. Полученная зависимость сорбции Bi-207 от температуры во времени представлена на рис.1

Исходя из рис.1 можно увидеть, что при проведении сорбции Bi-207 при t=80 °C, наблюдается увеличение степени сорбции в 2–2,5 раза и уже по истечении 2 часов она составляет ~ 50%, что дает возможность в дальнейшем определять Pb-210 через дочерний короткоживущий изотоп Bi-210.

Работа поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации в рамках базовой части госзадания, проект № FEUZ-2023-0013.

1. Нормы радиационной безопасности НРБ–99/2009. М. : Энергоатомиздат, 2010

РАЗРАБОТКА МЕТОДИКИ РАЗЛОЖЕНИЯ ЗОЛОТОНЕСУЩИХ РУД С СУЛЬФИДНО-УГЛЕРОДНОЙ МАТРИЦЕЙ

Федорова В.П.[1, 2], Игошева В.С.[1], Упорова Н.С.[1], Васильева Н.Л.[2], Киселева Д.В.[1, 2]

[1)] Институт геологии и геохимии УрО РАН

[2)] Уральский федеральный университет имени первого президента России Б. Н. Ельцина

E-mail: 89681169121vika@mail.ru

METHODOLOGY FOR THE DIGESTION OF GOLD-BEARING ORES WITH SULFIDE CARBONACEOUS MATRIX

Fedorova V.P.[1, 2], Igosheva V.S.[1], Uporova N.S.[1], Vasilyeva N.L.[2], Kiseleva D.V.[1, 2]

[1)] The Zavaritsky Institute of Geology and Geochemistry UB RAS

[2)] Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin

The study describes the optimized protocol for the roasting of gold-bearing ore with sulfide carbonaceous matrix. STA 449F5 Jupiter thermal analyzer is used to record the DTA, TG and DTG curves in air. The proposed roasting protocol provides the full removal of sulfur and carbon after 3 hours.

Необходимым шагом в разложении золотонесущей руды является отделение сульфидной серы и углерода ввиду их высокой сорбирующей способности золота. Кислотное озоление и прокаливание имеют ряд преимуществ и недостатков, поэтому целесообразно проведение эксперимента и выделение наилучшего варианта отделения серы и углерода. А также оптимизации параметров избранного метода.

Основным реагентом в кислотном озолении принята смесь концентрированных азотной кислоты и перекиси водорода в соотношении 10:1 [1]. В условиях лаборатории ИГГ УрО РАН и при варьировании параметров автоклавного разложения (температуры, времени) позитивных результатов получено не было. В каждом случае мы наблюдали образование желтого осадка (предположительно серы), а также черного осадка (предположительно углерода). По литературным данным коллоидная сера и уголь сорбируют золото со степенью извлечения из объема раствора до 100 %. Данный тип вскрытия признали нецелесообразным для применения в случае исследуемого типа проб.

Единой температурной программы обжига золотонесущей руды не существует, оптимизация температуры и времени прокаливания специфичны и подбираются для каждого типа проб.

Для определения параметров обжига в атмосфере кислорода использовали метод термического анализа. По характерным пикам на кривых ДТА предполагалось определение конечных температур термических эффектов

окисления сульфидов и углерода, что позволяло оптимизировать температуру прокаливания образцов.

Экспериментальная часть выполнена с помощью термического анализатора STA 449F5 Jupiter (NETZSCH). В качестве эталона использовали оксид алюминия.

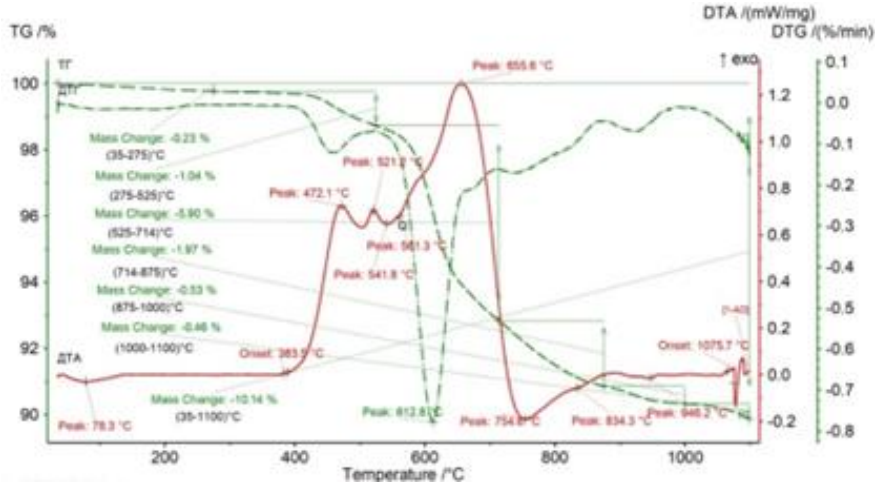


Рис. 1. Вид термограммы, полученной для образца золотонесущей руды ОК-498/2021 (ω (С) = 5 % мас., w(Sсульф.)= 2 % мас.)

На кривой ДТА можно выделить температурные диапазоны, характерные для протекания реакций в халькопиритных и углеродсодержащих рудах. Это подтверждается литературными данными [2].

После анализа термограмм определили, что для данного типа проб эффекты окисления углерода и сульфидной серы заканчиваются при температуре 700˚С.

Для проведения эксперимента с варьированием времени обжига отбирали 1,5 грамма руды ОК-498/2021 и обжигали ее в течение различного времени при 700℃, измеряли потерю массы. Потери при прокаливании становились постоянными при времени прокаливания от 2,5 до 3 часов.

Итогом проведенной работы являлась оптимизация параметров отделения сульфидно-углеродной матрицы на первичном этапе разложения золотонесущих проб.

Работа выполнена в ЦКП «Геоаналитик» в рамках темы № 123011800012-9 государственного задания ИГГ УрО РАН.

1. Пономарева Г. А., Панкратьев П. В. Способ разложения проб при определении благородных металлов в углеродистых породах/ Патент RU 2 409 810, 2010 – 9с.;
2. Саргсян Л.Е., Оганесян А.М., Франгулян А.А. Изучение механизма обжига пиритовых и пирит-халькопиритовых концентратов методом дифференциально-термического анализа, Вестник ГИУА ‘‘Металлургия, материаловедение, недропользование’’ 17(2), с. 31-39 (2014).

ОПРЕДЕЛЕНИЕ АЛЬФА-ИЗЛУЧАЮЩИХ РАДИОНУКЛИДОВ В ОБРАЗЦАХ ТВЕРДЫХ РАДИОАКТИВНЫХ ОТХОДОВ АО ЧМЗ

Фомин А.В.[1], Семенищев В.С.[1], Скрипченко С.Ю.[1], Титова С.М.[1], Наливайко К.А.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: andreska7734@gmail.com

DETERMINATION OF ALPHA EMITTING RADIONUCLIDES IN SAMPLES OF SOLID RADIOACTIVE WASTE FROM JSC CMP

Fomin A.V.[1], Semenishchev V.S.[1], Skripchenko S.Yu.[1], Titova S.M.[1], Nalivaiko K.A.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The work describes the results of analysis of alpha emitting radionuclides in samples of solid radioactive waste from JSC CMP. It was shown that the samples contain Th-230 and Po-210 as alpha emitters, which cannot be determined by gamma spectrometry.

В настоящее время ожидают кондиционирования твердые радиоактивные отходы (ТРО), находящиеся в приповерхностных хранилищах АО «Чепецкий механический завод» (г. Глазов). Для реализации проекта кондиционирования отходов требуется их паспортизация по радионуклидному составу и удельной активности. В августе 2022 года было отобрано 28 проб ТРО с приповерхностного хранилища. По результатам γ-спектрометрии было определено, что радионуклидный состав образцов ТРО преимущественно представлен Ra-226 (до 100 кБк/кг) и его дочерними короткоживущими продуктами распада, однако встречаются образцы, с преимущественным содержанием U-238 в равновесии с Th-234, Pa-234 (до 30 кБк/кг) и Pb-210 (70 кБк/кг). Анализ суммарной удельной α- и β-активности проб показал, что суммарные α-активности проб находятся в диапазоне от 1,2 до 1250 кБк/кг, а суммарные β-активности – от 1,1 до 560 кБк/кг. При этом вопреки ожиданиям в большинстве проб суммарная α-активность существенно превышала суммарную β-активность (до 3,5 раз), что указывает на наличие в пробах α-излучающих радионуклидов, которые не определяются методом γ-спектрометрии.

Для уточнения радионуклидного состава отходов были проведены дополнительные α-спектрометрические измерения. Навески проб массой 1,5 г выщелачивали 20 мл 3М азотной кислоты, фильтровали и нейтрализовали аммиаком до pH = 6 – 7. Из полученного раствора проводили сорбцию на тонкослойном сорбенте MnO_2–ПЭ и измеряли сорбент на α-спектрометре. Альфа-спектры приведены на рис. 1. Результаты альфа-спектрометрии высокого разрешения показали наличие в образце шлама не только радия-226, но также и

Po-210, U-238 и Th-230. При этом результаты сорбции из повторно выщелоченной пробы показывают, что высокая суммарная альфа-активность проб, наиболее вероятно, обусловлена именно наличием Th-230. Присутствие Po-210 можно объяснить значительным возрастом шлама – за это время произошло частичное накопление относительно долгоживущего Pb-210 и его дочерних Po-210 и Bi-210. Наличие урана-238 и тория-230 объясняется тем, что все эти радионуклиды принадлежат к одному природному ряду распада урана-238, однако поведение этих радионуклидов не зависит от поведения радия-226. При этом Po-210 и Th-230 невозможно определить методом гамма-спектрометрии.

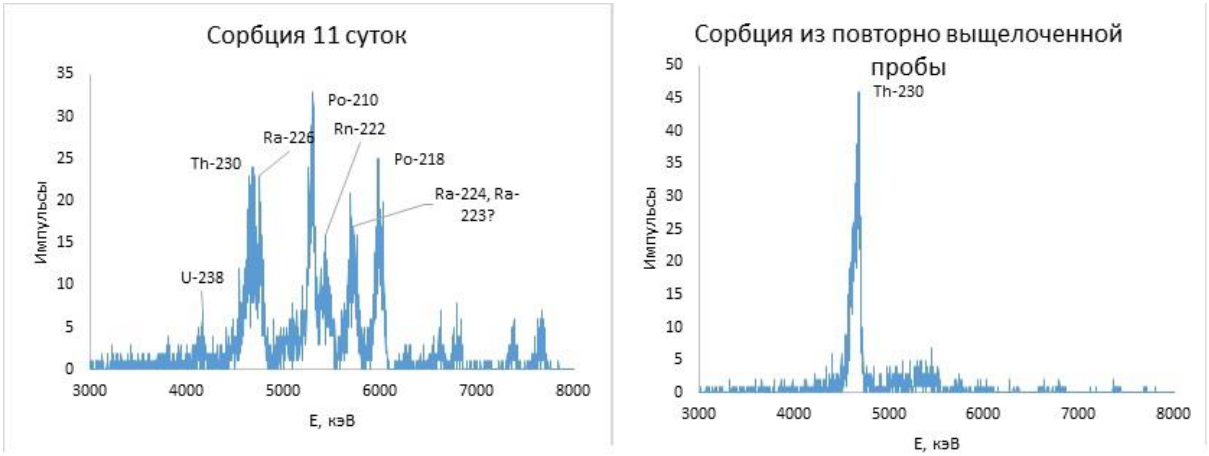


Рис. 1. Альфа-спектры выщелоченных проб РАО после сорбции на тонкослойном сорбенте MnO_2–ПЭ

Поскольку находящийся в ТРО уран потенциально может представлять коммерческую ценность при его извлечении, было интересно определить его изотопный состав. Пробы ТРО выщелачивали серной кислотой либо карбонатом натрия, после чего из полученных растворов сорбировали уран на анионите АМП для очистки от мешающих α-излучателей. Десорбцию урана с АМП осуществляли раствором нитрата аммония, из полученного раствора электролизом осаждали уран на стальной диск и измеряли на α-спектрометре. Было определено, что в ТРО присутствует как природный (коммерчески интересен), так и обедненный (не интересен) уран. Таким образом, для извлечения урана потребуется картирование хранилища по изотопному составу урана и удельной активности ТРО.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-29-00846, https://rscf.ru/project/22-29-00846/

ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ PF ОСАЖДЕНИЯ НА СВОЙСТВА ЧАСТИЦ ФТОРИДА ЦЕРИЯ

Клеена Л.А.[1], Гасимова А.Ф.[1], Дедюхин А.С.[1], Щетинский А.В.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: a.f.gasimova@gmail.com

STUDY OF THE EFFECT OF PRECIPITATION PF ON THE PROPERTIES OF CERIUM FLUORIDE PARTICLES

Kleena L.A.[1], Gasimova A.F.[1], Dedyukhin, A.S.[1], Shchetinskiy A.V.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Cerium fluoride particles have been synthesized by controlled double-jet precipitation method. Exploring of precipitation pF gives rise to control granulometric composition of the particles. Sedimentation size of cerium fluoride particles have been determined using laser diffraction method.

Контролируемое двухструйное осаждение (КДО) — перспективный метод синтеза крупнодисперсных осадков фторидов лантаноидов. Возможность тонкой настройки параметров процесса позволяет получать частицы с заданными свойствами. Метод уже нашел своё применение при производства галогенидов серебра, комплексных и смешанных гидроксидов, а также слоистых гидроксонитратов РЗЭ [1].

Фторид церия (III) является важным сырьем в металлургической и атомной промышленности. Применяется в качестве полупродукта при получении металлического церия, используется для изготовления электродов дуговых ламп и прожекторов. Находит своё применение в качестве добавки в нержавеющие, быстрорежущие, жаропрочные стали и чугуны, а также в стекла для атомной техники.

Целью данной работы является исследование влияния значения pF осаждения на свойства частиц фторида церия.

В ходе данной работы было изучено влияние pF осаждения на процесс формирования и роста частиц фторида церия. В качестве источника ионов церия был выбран раствор хлорида церия, полученный путём растворения карбоната церия в соляной кислоте. В качестве осадителя — раствор фторида аммония. Синтез проводили методом контролируемого двухструйного осаждения при постоянном значении pF — 1, 2, 3, 4 и 5. Гранулометрический состав образцов исследовали при помощи оптического микроскопа и лазерного анализатора частиц ANALYSETTE 22 NanoTec.

Выявлено, что средний размер частиц фторида церия в ходе осаждения при pF = 1 и 2 практически не изменяется. Полученный осадок с трудом поддается

фильтрации. Максимального размера достигают частицы, полученные в ходе осаждения при pF = 3 и 4. Средний диаметр частиц линейно увеличивается на протяжении всего синтеза. Концентрация фторид-ионов при pF = 5 является недостаточной для образования осадка фторида церия.

1. D.K. Aleshin, M.A. Mashkovtsev, Y.A. Kuznetsova, V.N. Rychkov, A.F. Zatsepin, E.V. Gordeev, Journal of Alloys and Compounds 805, 258–266, (2019).

РАСЧЕТ РЕАКТОРА ПАРОВОЙ КОНВЕРСИИ МЕТАНА ПО ОДНОМЕРНОЙ КИНЕТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

Голдобин Т.А.[1], Никитин А.Д.[1], Рыжков А.Ф.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: tifey.moget@gmail.com

CALCULATIONS OF A METHANE STEAM REFORMING REACTOR USING A ONE-DIMENSIONAL KINETIC MODEL

Goldobin T.A.[1], Nikitin A.D.[1], Ryzhkov A.F.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Calculations of the methane steam-reforming reactor were carried out using a one-dimensional kinetic model in the DWSIM program. The results are compared with thermodynamic calculations. For operating modes of an industrial reactor, the discrepancy between these calculations is from 5 to 8%.

Одной из перспективных целей, стоящей на сегодняшний день перед промышленностью и энергетикой, является развитие технологий для производства водорода [1]. Перевод на производство водорода возобновляемых источников энергии, несмотря на их бурное развитие, не обеспечит потребности человечества в водороде из-за недостаточного энергетического потенциала. Для атомных электростанций остается открытой проблема утилизации ядерных отходов. Основным источником водорода, по-видимому, останется ископаемое топливо (природный газ) [2]. В связи с этим требуется совершенствование технологии производства водорода в результате паровой конверсии природного газа.

В ходе предыдущих работ была создана расчетная модель технологической схемы промышленной установки паровой конверсии природного газа в программе DWSIM и выполнены термодинамические расчеты режимов работы установки. Целью данной работы является расчет реактора конверсии метана по одномерной кинетической модели для уточнения расчетов промышленной установки. Для расчета использована стандартная одномерная модель проточного реактора, представленная в программе DWSIM. Модель основана на законах сохранения массы и энергии и системе дифференциальных уравнений с производными первого порядка. Кинетические параметры, используемые при расчете, были выбраны по литературным данным в результате отдельно выполненного сопоставления значений скорости реакции паровой конверсии метана, рассчитанных по данным из нескольких источников.

Исходные данные для расчета (температура газа на входе и на выходе из реактора, давление газа на входе, соотношение H_2O/CH_4 в газе и расход газа на

входе в реактор,) выбраны с учетом режима работы промышленной установки и возможными диапазонами изменения режимных параметров. Проведены серии расчетов с варьированием режимных параметров. В результате расчета определен состав синтез-газа на выходе из реактора и степень конверсии метана. Полученные результаты сопоставлены с расчетами аналогичных режимов по термодинамической модели.

При увеличении отношения H_2O/CH_4 в газе на входе в реактор до 4 и расходе газа в 150 % от номинального, термодинамический расчет завышает степень конверсии метана на 7,2 % отн. При увеличении давления газа на входе в реактор на 5 % и номинальном расходе газа термодинамический расчет завышает степень конверсии метана на 5,3 % отн. Наименьшая ошибка при использовании термодинамического расчета (1,5 % отн.) имеет место при отношении H_2O/CH_4 в газе на входе в реактор равном 2. Полученные данные будут использованы для дальнейшего уточнённого расчета технологической схемы и оптимизации режима ее работы.

1. M. Jafari et al., Renev. Sust. Energ. Rev. 158, 112077 (2022)
2. R. Yukesh Kannah et al., Bioresour. Technol. 319, 124175 (2021)

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ СПОСОБОВ НАНЕСЕНИЯ СТЕКЛОГЕРМЕТИКОВ ПРИ СБОРКЕ ТОТЭ

Никонорова В.А.[1, 2], Кучугуров А.В.[1, 2], Голоднова А.И.[1], Горшков М.Ю.[1], Ерпалов М.В.[1, 2]

[1)] Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН

[2)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина

E-mail: terygold@yandex.ru

THE ANALYSIS OF THE METHODS OF APPLYING GLASS SEALANTS TO ASSEMBLE SOFC STACKS

Nikonorova V.A.[1, 2], Kuchugurov A.V.[1, 2], Golodnova A.I.[1], Gorshkov M.Yu.[1], Erpalov M.V.[1, 2]

[1)] Institute of High-Temperature Electrochemistry

[2)] Ural Federal University named after the First President of Russia B. N. Yeltsin

Sealants, which must have high adhesive properties, are important for the operation of SOFC STACKS. At the same time, the technology of applying the sealant has an effect on adhesion [1]. This article discusses various methods of applying glass sealants.

Стекла и стеклокерамика являются наиболее подходящими материалами для использования в качестве высокотемпературных стеклогерметиков при сборке стеков ТОТЭ. Это обусловлено возможностью варьирования и адаптации их свойств в широком диапазоне под конкретные условия эксплуатации [2].

Цель исследования – оценка влияния способа нанесения стеклогерметика на поверхности интерконектора и электролита на качество сборки ТОТЭ. Для достижения данной цели решены следующие задачи:

1. Получение составов для проведения эксперимента;
2. Отработка технологии нанесения стеклогерметика.

Для сборки элемента стека ТОТЭ использовалось стекло, от компании SOFCMAN разработанное спечально для сборки стеков ТОТЭ. В качестве склееваемых материалов использовались электролит YSZ(стабилизированный оксидом иттрия диоксид циркония) и материал интерконнектора сталь Crofer 22 APU.

Рассмотрены два способа нанесения стеклогерметиков: трафаретная печать чернилами на основе стеклогерметика и получение пленок методом шликерного литья.

Для трафаретной печати использовали чернила производства SOFCMAN нанесение чернил осуществлялось при помощи ракеля на электролит для проведения процесса сборки.

Процесс сборки слоистого образца электролит/стеклогерметик/интерконнектор, с промежуточными слоями из теклогерметика нанесенного методом трафаретной печати, заключался в спекании составных частей ТОТЭ при температуре 900°С и выдержке в течение 2 ч. в муфельной печи под нагрузкой 0,2 МПа.

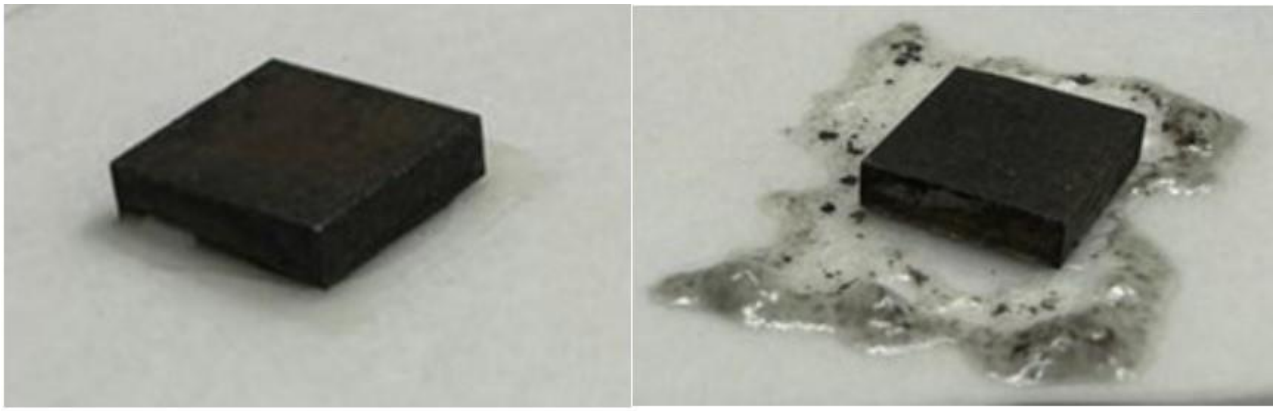


Рис. 1. Слоистый образец электролит/стеклогерметик/интерконнектор: а) полученный методом трафаретной печати, б) полученный методом шликерного литья

Фотография образца электролит/стеклогерметик/интерконнектор после термической обработки представлена на рисунке 1а.

Для получения пленки был приготовлен шликер (состава, масс.%: SiO_2 – 49,56, B_2O_3 – 14,11, Al_2O_3 – 13,66, Na_2O – 0,81, K_2O – 0,21 CaO – 19,13, SrO – 0,31, MgO – 1,99, ZrO_2 – 0,22, использовался растворитель 647 – 0,1, поливинилбутираль – 0,4 этанол – 0,25, и загуститель дибутилфталат – 0,13).

Готовый шликер перед литьем подвергается вакуумированию для удаления газовых пузырьков из объема жидкой массы. Далее через регулируемую щель фильеры шликер из дозирующего резервуара выливался на пленку. Сама фильера медленно перемещается вдоль пленки.

Стеклогерметик после полного высыхания сняли с поверхности пленки и перенесли на электролит для проведения процесса сборки. (рисунок 1 б)

У образца, где стеклогерметик нанесен методом трафаретной печати наблюдается герметичная плотная склейка между электролитом и интерконнектором, что нельзя сказать о стеклогерметике, полученном методом шликерного литья. Стеклогерметик, полученный методом шликерного литья не склеил между собой части стека ТОТЭ.

Хотя шликерное литье является распространенным методом нанесения стеклогерметиков был выявлен ряд недостатков, например:

- Быстрое загустевание пасты;
- Неполное слитие шликера из формы;

- Длительность процесса;
- Отсутствие герметичного соединения.

Таким образом, для сборки стеков ТОТЭ предлагается использовать метод трафаретной печати благодаря простоте использования, минимальным затратам времени и эффективности при сборке ТОТЭ.

1. Gurbinder K. Solid Oxide Fuel Cell Components. Interfacial Compatibility of SOFC Glass Seals. Springer International Publishing Switzerland, 2016. 408 p.
2. Baino F. , TomalinoM., Tulyaganov D. Ceramics, Glass and Glass-Ceramics // Springer Nature, 2021, P. 343.

КОРРОЗИОННОЕ ПОВЕДЕНИЕ ХАСТЕЛЛОЯ В РАСПЛАВАХ

Гордеева Ю.Ф.[1, 2, 4], Филатов Е.С.[3, 4]
[1)] Федеральное бюджетное учреждение Уральский региональный центр судебной экспертизы Министерства юстиции Российской Федерации, г. Екатеринбург, ул. Бажова 72., Россия
[2)] Уральский государственный горный университет, г. Екатеринбург, ул. Куйбышева 30., Россия
[3)] Институт высокотемпературной электрохимии Уральского отделения РАН, г. Екатеринбург, ул. Академическая, д. 20., Россия
[4)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, ул. Мира 19, Россия
E-mail: julia100990@inbox.ru

CORROSION BEHAVIOR OF HASTELLOY IN MELTS

Gordeeva J.F.[1, 2, 4], Filatov E.S.[3, 4]
[1)] Federal budgetary institution Ural regional center for forensic examination of the Ministry of justice of the Russian Federation, Yekaterinburg, Bazhova st., 72., Russia
[2)] Ural State Mining University, 30, Kuibysheva St., 620144, Yekaterinburg, Russia.
[3)] The Institute of High Temperature Electrochemistry of the Ural Branch of Russian Academy of Sciences, 20, Akademicheskaya St., 620990 Yekaterinburg, Russia.
[4)] Ural Federal University, Yekaterinburg, 19, Mira St., Yekaterinburg, Russia

Molten salts are used as electrolytes for electrolytic production and refining of many metals and alloys, also as media for thermochemical treatment of materials and their production by the "electrolysis-free" method.

Сплавы (стали) на основе никеля, содержащие хром, молибден, вольфрам, возможно, железо широко используются в качестве материалов для изготовления оборудования в высокотемпературных технологических процессах с применением растворов высоко-гигроскопических галогенидов (хлоридов) в расплавленных галогенидах (хлоридах) щелочных металлов.

Ранее было исследовано коррозионно-электрохимическое поведение ряда сплавов (Хастеллоев) ХН65МВУ, С 2000, С 276, в солевых системах KCl – $AlCl_3$ – $ZrCl_4$, которые показали высокое химическое сопротивление по сплошной (фронтальной) коррозии. Однако их поведение с точки зрения межкристаллитной коррозии при температурах выше 500ºС было неудовлетворительное.

Была измерена температурная зависимость (в интервале температур 270 - 370 ºС) равновесного потенциала алюминия в расплаве $NaAlCl_4$ (состава $NaCl/AlCl_3$ - 1.0/1.0) относительно хлорсеребряного электрода сравнения. Его величины уменьшались с понижением температуры на 100 ºС от - 0.7 до - 0.835 мВ.

Были измерены стационарные потенциалы сплава G35 в зависимости от температуры в этом же диапазоне. Установлено, что величины стационарных потенциалов (потенциалов коррозии) сплава практически не изменяются с температурой, оставаясь постоянной величиной 0.020 мВ относительно хлорсеребряного электрода сравнения с точностью до +/- 1 мВ. Поскольку значения измеренных экспериментально равновесных потенциалов алюминия были пересчитаны по отношению к хлорному электроду, то, измерив разность потенциалов между алюминием и исследуемым сплавам, легко вычислить значения стационарных потенциалов материалов оборудования по отношению к хлорному электроду сравнения.

Были также измерены вольтамперные характеристики этого материала для температуры 370 ºС. Вольтамперная поляризационная кривая зависит экспоненциально от потенциала поляризации с ярко проявляющимся перегибом в районе потенциалов - 1.32 В относительно хлорсеребряного электрода сравнения. Практически ниспадающая часть поляризационной кривой, начинающаяся от потенциала перегиба, линейная, уравнение которой описывается выражением,

$$\lg I = \alpha V + b = 0{,}7192 + 0{,}4477\ V,$$

где I – сила тока поляризации, в мА/ см^2;

V – величина потенциала поляризации;

αV - сила тока коррозии материала G 35 при отсутствии поляризации, т.е. когда напряжение поляризации равно нулю.

Площадь рабочего электрода была равна 4.26 см^2 сила тока I равному 0.72 мА и, следовательно, плотность тока коррозии в расчете на 1 см^2 0.169 мА/ см^2.

Анализ результатов измерений равновесных потенциалов алюминия в зависимости от концентрации и температуры позволяет сделать важный вывод о принципиальной возможности реализации создания датчика контроля и регулирования состава хлоралюмината калия.

1. G.A. Abramov, M.M.Vetlyukov, G.I.Gukalo, Theoretical foundations of aluminum electrometallurgy // Metallurgizdat, Moskow, 1953, pp. 206-207 (in Russian).
2. Yu.V. Bajmakov, M.M. Vetyukov, Molten salts electrolysis // Metallurgiya, Moskow, 1966, pp. 560-561 (in Russian).
3. V.Y. Blinkin, V.I. Novikov, Molten salt reactors // Atomizdat, Moskow, 1978 pp. 111-112 (in Russian).
4. L. E. Ivanovsky, V. A. Khokhlov and G. F.Kazantsev, Physical Chemistry and Electrochemistry of Chloroaluminate Melts // Nauka, Moscow, 1993, pp. 249–249 (in Russian).
5. A. G. Morachevsky, Handbook of Molten Salts // Khimiya, Leningrad, 1972, pp. 152–152 (in Russian).

РАЗРАБОТКА МЕТОДИК АНАЛИЗА ТОПЛИВНОЙ КОМПОЗИЦИИ НА ОСНОВЕ ФТОРИДОВ ЛИТИЯ, НАТРИЯ И КАЛИЯ

Грубцова К.А[1], Лисиенко Д.Г[1], Домбровская М.А[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: m.a.dombrovskaia@urfu.ru

DEVELOPMENT OF A TECHNIQUE FOR THE ANALYSIS OF A FUEL COMPOSITION BASED ON LITHIUM, SODIUM AND POTASSIUM FLUORIDES

Grubtsova K.A[1], Lisienko D.G[1], Dombrovskaya M.A[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Method for determining the main and impurity elements in LiF-NaF-KF. Methods for acid digestion of samples were chosen. The optimal conditions for recording the spectrum were selected. Metrological characteristics of the technique were evaluated.

В последнее время все большую актуальность приобретает идея создания замкну-того топливного цикла, предполагающая полное использование делящихся материалов, и минимизацию радиоактивных отходов, образующихся в результате деления урана и плутония в ядерных реакторах [1]. В настоящий момент известны два состава расплавов солей, в которых удобно осуществлять процесс трансмутации трансурановых элементов.

Первый состав - фториды лития и бериллия. Второй, который изучен в данной работе, - фториды лития, натрия и калия, с молярной долей (%) 46,5 LiF – 11,5 NaF – 42 KF, представляющие эвтектическую смесь с достаточно низкой температурой плавления. Преимущество этой композиции состоит в высокой растворимости фторида плутония, поддерживающего цепную реакцию, что позволяет накопить в ней большее количество америция для дожигания. Среди недостатков - высокая коррозионная активность по отношению к конструкционным материалам [2].

Целью данной работы являлась разработка методик определения основных (Li, Na, K) и примесных элементов методами масс-спектрометрии с индуктивно-связанной плазмой (ИСП-МС) и атомно-эмиссионным с дуговым возбуждением. Контролируемыми макропримесными элементами были Ce, Nd и U, с массовой долей около 14 %, 4 % и 5 % соответственно. Микропримесные элементы, появляющиеся за счет коррозии конструкционных материалов, - это Al, B, Ca, Cd, Cr, Cu, Fe, Mg, Mn, Mo, Ni, Pb, Si, Te, Ti, Zr, W.

При определении основных, макро- и микропримесных (Al, Cd, Cr, Cu, Mg, Mn, Mo, Ni, Pb, Te, Ti, Zr, W) компонентов использовали метод ИСП-МС. Измерения проводили на масс-спектрометре ELAN 9000 (Perkin Elmer, США).

Для приготовления анализируемых проб опробовали два способа кислотного разложения: растворение в стеклоуглеродных стаканах на плите хлорной и серной кислотами и в автоклаве Hot Box 300 (ООО «САС», г. Красноярск) азотной кислотой.

Были выбраны оптимальные условия регистрации, подобрана изотопы аналитов с минимальными спектральными помехами, рекомендованы способы учета наложений. Оценена относительная повторяемость результатов измерений, соответствующая обычному уровню показателя для реализованного метода.

Элементы B, Ca, Fe, Si, контроль содержания которых методом ИСП-МС затруднен, определяли атомно-эмиссионным методом с дуговым возбуждением. Для регистрации спектров и обработки результатов использовали спектрометр PGS-2 (Carl Zeiss Industrielle Messtechnik GmbH, Германия) с твердотельным детектором МАЭС (ООО «ВМК-Оптоэлектроника», г. Новосибирск), работающим с программным обеспечении «Атом», и генератор «Fireball» (ООО «ВМК-Оптоэлектроника», г. Новосибирск). Навеску материала испаряли из кратера графитового электрода формы «рюмка» в дуговом разряде переменного тока. Выбраны линии аналитов, свободные от наложений и молекулярных полос. В режиме временной развертки спектров изучено влияние разбавления графитом на интенсивность линий. Оптимальное соотношение пробы с графитом 1:1. Введение графита повышает надежность и упрощает процедуру градуировки.

1. Новиков В.М., Игнатьев В.В., Федулов В.И. и др. Жидкосолевые ЯЭУ: перспективы и проблемы / Атомная энергия. 2006. Т. 101. Вып. 4. С. 278-285.
2. Lane, James A. Fluid Fuel Reactors. Reading, MA: Addison-Wesley Pub, 1958, p. 570.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ PF ОСАЖДЕНИЯ НА РАЗМЕР ЧАСТИЦ ФТОРИДА ЭРБИЯ В УСЛОВИЯХ КОНТРОЛИРУЕМОГО ДВУХСТРУЙНОГО ОСАЖДЕНИЯ

Угрюмова М.В.[1], Якушев Ю.А.[1], Расторгуева М.И.[1], Гасимова А.Ф.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: mari.ugryumova.02@mail.ru

INVESTIGATION OF THE INFLUENCE OF PF OF PRECIPITATION ON PARTICLE SIZE OF ERBIUM FLUORIDE

Ugryumova M.V.[1], Iakushev Y.A.[1], Rastorgueva M.I.[1], Gasimova A.F.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The study is dedicated to detection of dependency between morphology and particle size distribution of erbium fluoride precipitate formed by controlled double-jet precipitation method and the pF value in the reactor.

На данный момент существующий метод получения фторидов лантаноидов прямым осаждением даёт плохо фильтрующийся осадки, для отделения которых от раствора необходимо использовать специальную аппаратуру.

Целью данной работы является исследование влияния pF осаждения на гранулометрический состав частиц фторида эрбия.

Фторид эрбия, за счет своих физико-химических является удобным для транспортировки веществом, из которого можно получить металлический эрбий. За счет схожести свойств фторидов лантаноидов, результаты, полученные в ходе данного исследования применимы не только к фториду эрбия, но и к соединениям другим лантаноидов.

Источником ионов эрбия выступает раствор хлорида эрбия, полученный путем растворения оксида эрбия в соляной кислоте, в качестве источника фторид-ионов выступает раствор фторида аммония с концентрацией 185 г/л. Осаждение проводили методом КДО (контролируемого двухструйного осаждения), с постоянной скоростью подачи раствора хлорида эрбия и переменной скоростью подачи раствора фторида аммония, с контролем значения pF в реакторе ион-селективными электродами. В ходе осаждение проводится отбор проб, анализ проб проводим как на оптическом микроскопе, так и методом лазерной дифракции на приборе ANALYSETTE 22 NanoTec plus FRITSCH

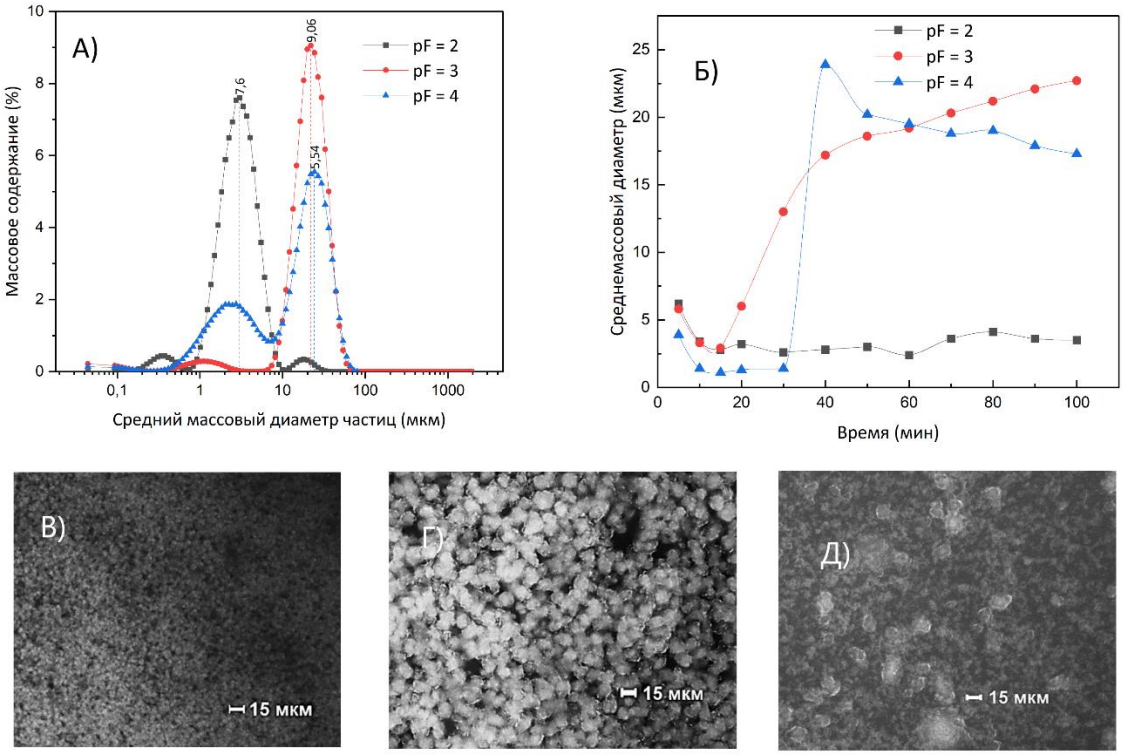


Рис. 1. Распределение по размерам частиц фторида эрбия в зависимости от pF осаждения - а); динамика изменения среднего массового диаметра фторида эрбия в процессе осаждения - б); фотографии осадков на финальном этапе осаждения, полученных при значениях pF=2, pF=3 и pF=4 - в), г) и д) соответственно

Установлено, что значительное влияние на образование и скорость роста частиц оказывает значение равновесной концентрации фторид-ионов.

При pF = 2 образовался осадок, состоящий из мелких частиц, при осаждении которого рост этих частиц не наблюдался. При фильтровании данного осадка наблюдался мутный фильтрат, что говорит о том, что часть мелких частиц осадка пропускалось через фильтр, фильтрация продолжалась в течение 7-8 мин.

При pF = 4 полученный осадок состоял из мелких частиц, агрегированных в более крупные скопления. При фильтровании такого осадка также наблюдался мутный фильтрат, фильтрация длилась в течение 10 мин.

При pF = 3 был получен осадок, фракционный состав которого имеет узкое распределение частиц по размеру, быстро оседает после осаждения и фильтруется в течение 2 мин.

1. И.В. Шахно, З.Н. Шевцова, П.И, Федоров, С.С. Коровин. Химия и технология редких и рассеянных элементов, ч. II. М.: Высшая школа. (1976)

СТОХАСТИЧЕСКОЕ РАСЩЕПЛЕНИЕ ЦИКЛОВ И ПЕРЕХОД К ХАОСУ В ТЕРМОХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССАХ

Иваненко Г.А.[1], Башкирцева И.А.[1]
[1)] Кафедра теоритической и математической физики Уральского Федерального университета
E-mail: g.ivanenko11@yandex.ru

STOCHASTIC SPLITTING OF CYCLES AND TRANSITION TO CHAOS IN THERMOCHEMICAL PROCESSES

Ivanenko G.A.[1], Bashkirtseva I.A.[1]
[1)] Department of Theoretical and Mathematical Physics of the Ural Federal University

For the thermochemical model, zones of especially sensitive canard cycles are localized. The mechanism of noise-induced splitting of limit cycles is investigated. A parametric analysis of stochastic phenomena has been carried out using Lyapunov exponents and the stochastic sensitivity technique.

При изучении кинетики термохимических реакций особое внимание исследователей привлекают колебательные режимы с существенными изменениями концентрации реагентов и температуры. Зачастую такие изменения приобретают резкий, скачкообразный характер. Математические такие колебательные режимы могут быть описаны так называемыми циклами-канардами. В данной работе рассматривается термохимическая модель Зельдовича-Семёнова в присутствии случайных возмущений. Изучена детерминированная модель, построены бифуркационные диаграммы, отражающие поведение системы при различных значениях параметров. Обнаружены и локализованы зоны циклов-канардов для осциляционных аттракторов, являющихся особо чувствительными как к вариации параметров, так и к случайным возмущениям. Получено параметрическое описание амплитудно-частотных характеристик найденных циклов-канардов. С помощью аппарата ляпуновских показателей изучены возможные переходы от порядка к хаосу, вызываемые случайными возмущениями. В работе исследовано явление стохастического расщепления в зоне циклов-канардов. Для параметрического анализа этих явлений развит математический аппарат анализа стохастической чувствительности равновесных и осцилляторных аттракторов, а также метод доверительных областей.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда №23-21-00042

1. Ряшко Л.Б., Башкирцева И.А., «Stochastic Bifurcations and Excitement in the ZS-Model of a Thermochemical Reaction», mathematics, 10, 960 (2022)

2. Башкирцева И.А., Рязанова Т.В., Ряшко Л.Б., “Компьютерное моделирование нелинейной динамики. Непрерывные модели. Учебное пособие”, Издательство Уральского университета (2017)

РАЗРАБОТКА МЕТОДИКИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СОДЕРЖАНИЯ КИСЛОРОДА В НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОМ КАРБИДЕ НИОБИЯ

Калинина А.Е.[1], Данилов Д.А.[1], Курлов А.С.[2]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
[2)] Российская академия наук, Уральское отделение, Институт химии твердого тела, Екатеринбург, Россия
E-mail: alenakalinina712@gmail.com

OXYGEN DETERMINATION IN NANOCRYSTALLINE NIOBIUM CARBIDE

Kalinina A.E.[1], Danilov D.A.[1], Kurlov A.S.[2]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia
[2)] Institute of Solid State Chemistry, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia

Carrier gas hot extraction method was applied for the determination of oxygen in nanocrystalline niobium carbide. Measurement parameters ensuring correct and reproducible results were determined and experiments using linear heating were performed.

Карбид ниобия является одним из компонентов высокотемпературной керамики, имеет ряд преимуществ: высокая твердость, устойчивость к окислению и химическому воздействию. Помимо керамики нашел свое применение в металлургической и ядерной промышленности [1].

В настоящее время осуществляется постепенный переход от материалов с микрокристаллической структурой к материалам с нанокристаллической структурой, который сопровождается улучшением их функциональных свойств. Однако вместе с переходом на нанокристаллические порошки усугубилась проблема, связанная с их загрязнением, в частности кислородом, который отрицательно влияет на чистоту карбида и его свойства.

Получают нанокристаллический карбид ниобия с помощью высокоэнергетического размола в планетерной шаровой мельнице, используя мелющие шары из твердого сплава WC с некоторым количеством Co, средним размером частиц от 60 до 30 нм. Для сравнения средний размер частиц микрокристаллического карбида ниобия 3-5 мкм.

Для определения массовой доли кислорода используется метод восстановительного плавления, который основан на нагревании образца в графитовом тигле в потоке инертного газа-носителя, экстрагировании содержащихся в нем газов с последующим определением выделившегося оксида углерода, путем измерения поглощения в инфракрасной области спектра.

Применяли систему HORIBA EMGA-620W, которая позволяет определять содержание газообразующих примесей и предназначена для измерения

концентрации кислорода и азота в сталях, цветных металлах и неметаллических материалах в лабораториях промышленных предприятий и научно-исследовательских учреждений, выполняющих количественный химический анализ металлов и сплавов.

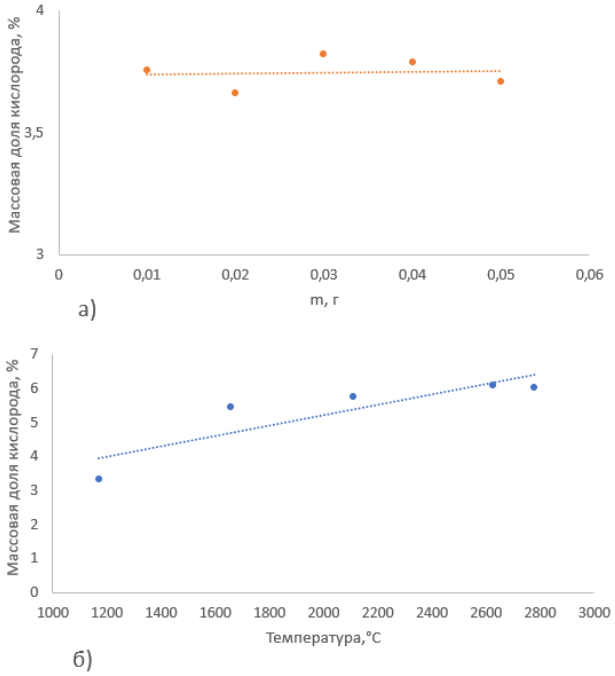


Рис. 1. а) Зависимость содержания кислорода от массы пробы; б) Зависимость содержания кислорода от температуры.

Для определения параметров измерения, обеспечивающих правильные и воспроизводимые результаты, было исследовано влияние температуры и соотношение массы пробы и графита тигля на полноту экстракции кислорода .

Определено, что при увеличении времени размола, т. е. уменьшении размера частиц частиц, массовая доля кислорода в образце увеличивается, за счет увеличения его сорбции и образования оксидных слоев на карбидных частицах.

Для выявления механизмов карботермического восстановления кислородсодержащих соединений были получены данные о зависимости энергии Гиббса от температуры для различных реакций (программа HSC Chemistry), также проведены эксперименты, где образцы подвергались линейному нагреву. Построена сводная эвалограмма, на которой отображен ряд пиков, характеризующих исследуемые пробы.

Полученные результаты могут лечь в основу методики по определению кислорода в нанопорошках NbC.

1. Э. Стормс. Тугоплавкие карбиды. М.: Атомиздат, 1970. 75 с.

ХРОНОАМПЕРОМЕТРИЧЕСКИЙ СПОСОБ ОПРЕДЕЛЕНИЯ АНТИОКСИДАНТНОЙ ЕМКОСТИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КОМПЛЕКСОВ ЖЕЛЕЗА РАЗНОЙ ГИДРОФИЛЬНОСТИ

Карманова А.В.[1], Салимгареева Е.Р.[1], Герасимова Е.Л.[1], Иванова А.В.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: annakarmanovaaaaa@mail.ru

CHRONOAMPEROMETRIC METHOD FOR DETERMINING ANTIOXIDANT CAPACITY USING IRON COMPLEXES OF DIFFERENT HYDROPHILITY

Karmanova A.V.[1], Salimgareeva E.R.[1], Gerasimova E.L.[1], Ivanova A.V.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

It has been established in the work that the value of the Fe(II) oxidation current can be taken as an analytical signal and used as a source of information on AOC. The AOC of some antioxidants was determined. The range of analyzed concentrations and the detection limit of the method are established.

Известно, что антиоксиданты (АО) играют важную роль в метаболизме человека, поэтому разработка способов определения антиоксидантной емкости (АОЕ) в настоящее время является актуальной задачей современной химии и медицины.

Для определения АОЕ разработано большое количество различных методов анализа, которые с точки зрения механизма АО действия в организме человека можно подразделить на методы с переносом электрона (ЕТ), переносом атома водорода и хелатирование ионов металлов переменной валентности. Среди существующих методов, способы, основанные на ЕТ-механизме, являются более простыми в реализации, особенно при разработке портативных устройств, точными и информативными. Поскольку процесс взаимодействия АО с модельным окислителем сопровождается переносом электрона, для оценки АОЕ целесообразно использовать электрохимические методы анализа, отличающиеся простотой методик и оборудования, невысокой стоимостью приборов и реактивов, позволяющие анализировать мутные и окрашенные образцы.

В данной работе определение АОЕ проводили хроноамперометрическим способом с использованием комплексов Fe(III) [1]. Поскольку АО представляют большую группу соединений, обладающих разной гидрофильностью, в качестве модели окислителя нами были предложены, помимо водорастворимого $K_3[Fe(CN)_6]$, Fe(III)-бипиридин и Fe(III)-фенантролин, растворимые в органических средах.

Способ определения АОЕ заключается в регистрации хроноамперограмм комплекса Fe(II), образующегося при взаимодействии АО с модельным окислителем, и после добавки Fe(II). Исследования проводили в среде 0,1 М KCl и ацетонитриле с 0,1 М $LiClO_4$. Изменение тока окисления регистрировали в течение 80 с при потенциалах 0,45 В для K_4 $[Fe(CN)_6]$ и 1,2 В для Fe(III)-бипиридин и Fe(III)-фенантролин. Экспериментально установлено, что 75 с достаточно для достижения стационарного состояния.

Получены зависимости тока окисления от концентрации комплексов $K_4[Fe(CN)_6]$, Fe(II)-бипиридин и Fe(II)-фенантролин. Зависимости имеют линейный вид в диапазонах концентраций $4 \cdot 10^{-6}$ - $1 \cdot 10^{-3}$ М. Предел обнаружения составил $3 \cdot 10^{-6}$ М.

Предложенным способом определена АОЕ растворов аскорбиновой кислоты и цистеина при разных концентрациях. Правильность способа оценена методом «ведено – найдено» с учетом стехиометрических коэффициентов. Зависимость тока окисления Fe(II) от концентрации АО имеет линейный вид в диапазоне $5 \cdot 10^{-6}$ - $4 \cdot 10^{-4}$ М во всех случаях.

Таким образом, в данной работе предложен хроноамперометрический способ определения АОЕ с использованием комплексов Fe(II), обладающих разной гидрофильностью. По полученным данным видно, что значение тока окисления Fe(II) изменяется пропорционально концентрации антиоксидантов в пробе. Таким образом, рассматриваемый сигнал можно принять за аналитический и использовать как источник информации об АОЕ. Дальнейшая работа будет направлена на расширение круга анализируемых объектов и создание портативного устройства для определения АОЕ.

1. Kh. Z. Brainina, D.P. Varzakova, E.L. Gerasimova, J. Anal. Chem. 67 (4), 364-369 (2012).

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ АЭРОЗОЛЕОБРАЗОВАНИЯ ПРИ АНАЛИЗЕ СОЛЕЙ ГАЛОГЕНИДОВ МЕТАЛЛОВ МЕТОДОМ ВОССТАНОВИТЕЛЬНОГО ПЛАВЛЕНИЯ

Карташова Е.С.[1], Данилов Д.А.[1], Половов И.Б.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: k543lena5@yandex.ru

THE EFFECT OF AEROSOL FORMATION ON ANALYSIS OF METAL HALIDES BY CARRIER GAS HOT EXTRACTION

Kartashova E.S.[1], Danilov D.A.[1], Polovov I.B.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The effect of aerosol formation on the results was examined in the determination of oxygen by carrier gas hot extraction method. The effect of temperature on the degree of oxygen extraction due to aerosol formation has been investigated. A graphite capsule has been proposed to obtain correct results

Метод восстановительного плавления в современном мире широко применяют для определения газообразующие примесей в металлах, сплавах, некоторые системы определения примесей позволяют анализировать керамику [1]. Одним из бурно развивающихся направлений в методе восстановительного плавления является анализ солей галогенидов металлов, широко применяемых в различных отраслях народного хозяйства.

Такие объекты анализ обладают рядом недостатков, которые затрудняют их анализ: низкие температуры кипения; сорбционная активность возгонов; наличие в составе компонентов, проявляющих высокое сродство к кислороду; выделение веществ, корозионоактивных по отношению к конструкционным составляющим газоанализатора.

Метод восстановительного плавления основан на реакционной газовой экстрации, суть которой заключается в высокотемпературном химическом обращении кислорода пробы в монооксид углерода, доставляющийся газом-носителем к ИК-детектору [2].

В процессе восстановительного плавления активно выделяющиеся горячие пары пробы встречаются с холодным газом-носителем, что приводит к образованию аэрозоля в верхней части тигля. В зависимости от температуры зона аэрозолеобразования может локализоваться по высоте тигля. Выделяющиеся кислородсодержащие примеси, не успевшие вступить в реакцию восстановления, поглощаются конденсированной матрицей пробы, что приводит к занижению результатов. Таким образом, необходимо отделить зону испарения пробы и взаимодействия кислорода с углеродом от зоны аэрозолеобразования.

При работе применялась система определения газообразующих примесей HORIBA EMGA620W/C.

Исследовано влияние температуры процесса на степень извлечения кислорода, значение которой обусловлено образованием аэрозоля. Предложено использование графитовой капсулы для разделения зон восстановления и зоны аэрозолеобразования.

1. Григорович К. В. Новые возможности современных методов определения газообразующих примесей в металлах // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. - 2007. - №1 (73). - С. 23-34.
2. Вассерман А.М. Определение газов в металлах / Вассерман А.М., Кунин Л.Л., Суровой Ю.Н. // М.: Наука, 1976. 344 с.

МЕХАНИЗМ СОРБЦИИ УРАНА АНИОНИТОМ АМ-4ВП ИЗ СУЛЬФАТНО-ХЛОРИДНЫХ РАСТВОРОВ СКВАЖИННОГО ПОДЗЕМНОГО ВЫЩЕЛАЧИВАНИЯ

Каёткин В.Е.[1], Титова С.М.[1], Рычков В.Н.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: vadim.kaetkin@urfu.ru

MECHANISM OF URANIUM SORPTION BY ANION EXCHANGER AM-4VP FROM IN-SITU LEACHING SULFATE-CHLORIDE SOLUTIONS

Kayotkin V.Ye.[1], Titova S.M.[1], Rychkov V.N.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The mechanism of uranium sorption by anion exchanger AM-4VP in chloride-form from sulfate-chloride solutions was determined with infrared spectroscopy method. Infrared spectra showed that uranium sorption goes by two mechanisms – ion exchange and addition reaction.

В настоящее время ведутся работы по освоению уранового месторождения Добровольное методом скважинного подземного выщелачивания (СПВ). Извлечение урана из руд осуществляется растворами серной кислоты, однако продуктивные растворы (ПР) для данного месторождения отличаются повышенным содержанием хлорид-ионов до 7-9 г/дм^3. Традиционно для выделения урана из ПР, полученных в ходе СПВ применяется метод ионного обмена, но используемые в настоящее время в урановой технологии аниониты будут не эффективны из-за конкурентной сорбции хлорид-ионов. Анионит марки АМ-4ВП (ГП «Смолы», Россия) проявил удовлетворительные емкостные характеристики по урану в условиях повышенного содержания хлорид-ионов.

Целью данной работы являлось определение механизма сорбции урана анионитом АМ-4ВП (в хлоридной форме) из сернокислых ПР СПВ с содержанием хлорид-ионов до 7-9 г/дм^3 методом ИК-спектрометрии. Регистрацию ИК-спектров анионита до и после сорбции урана (Рис. 1) проводили с помощью спектрометра Bruker VERTEX 70.

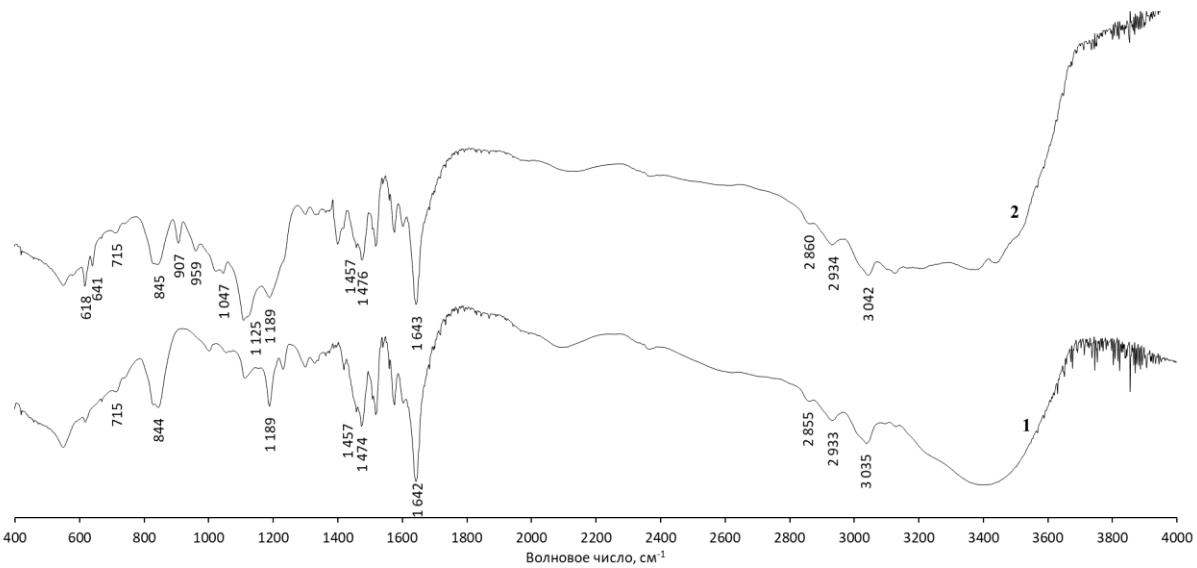


Рис. 1. ИК-спектры анионита АМ-4ВП в хлоридной-форме до сорбции (1) и после сорбции (2) урана из сернокислых ПР СПВ с повышенным содержанием хлорид-ионов

В полученных ИК-спектрах большинство пиков соответствуют колебаниям группировок матрицы анионита и его функциональных групп [1]. После сорбции урана в спектре анионита АМ-4ВП появляются пики поглощения ассиметричных трижды вырожденных колебаний $[SO_4]^{2-}$-группы (618, 1047, 1125 $см^{-1}$) и антисимметричных валентных колебаний связи U-O сульфатного комплекса уранила (907 $см^{-1}$). Пик в области 907 $см^{-1}$ указывает на связывание атома урана пятью лигандами, а 641 $см^{-1}$ – на связывание атомов урана кислородным мостиком. Следовательно, уран сорбируется в виде комплексов $[U_2O_5(SO_4)_2]^{2-}$ по реакции ионного обмена. Пик в области 959 $см^{-1}$ указывает на колебания связи U-O молекулы уранилхлорида. Согласно диаграммам состояния, при концентрации хлорид-ионов 7-9 $г/дм^3$ уран находится в растворе в виде катионов UO_2Cl^+, которые могут сорбироваться анионитом в хлоридной форме по реакции присоединения.

Таким образом, по результатам ИК-спектрометрии можно сделать вывод, что уран сорбируется анионитом АМ-4ВП в хлоридной рабочей форме по двум механизмам: в виде сульфатного комплекса $[U_2O_5(SO_4)_2]^{2-}$ по реакции ионного обмена, а также в виде комплекса UO_2Cl^+ по реакции присоединения.

1. Семушкин А. М., Яковлев В. А., Иванова. Е. В., Инфракрасные спектры поглощения ионообменных материалов: справочное пособие, Ленинград: Химия, (1980).

СОРБЦИЯ SB (III) ИЗ РАСТВОРОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МОДИФИЦИРОВАННОГО МОНТМОРИЛЛОНИТА

Холманских И.А.[1, 2], Белозерова А.А.[1, 2], Ординарцев Д.П.[1], Печищева Н.В.[1, 2], Шуняев К.Ю.[1, 2]
[1)] Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Института металлургии Уральского отделения РАН
[2)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина
E-mail: i.a.kholmanskikh@mail.ru

SORPTION OF SB (III) FROM SOLUTIONS USING MODIFIED MONTMORILLONITE

Kholmanskikh I.A.[1, 2], Belozerova A.A.[1, 2], Ordinartsev D.P.[1], Pechishcheva N.V.[1, 2], Shunyaev K.Yu.[1, 2]
[1)] Institute of Metallurgy Ural branch of the Russian Academy of Sciences
[2)] Ural Federal University named after the First President of Russia B. N. Yeltsin

The possibility of antimony (III) sorption on composite sorbents created by modification of montmorillonite was studied. Montmorillonite modified with Fe3O4 nanoparticles and cationic surfactant showed a better degree of antimony (III) sorption compared to other modifications.

Сурьма и ее соединения токсичны. Поскольку сурьма естественным образом содержится в окружающей среде в низких содержаниях, то человек ежедневно подвергается ее воздействию. Высокие уровни сурьмы могут быть обнаружены на полигонах с отходами или вблизи предприятий, которые занимаются переработкой руд и горных пород, содержащих сурьму. Одним из наиболее эффективных способов очистки водных растворов от сурьмы является сорбция [1].

Целью данной работы было изучить возможность сорбции Sb (III) на композитных сорбентах, созданных модификацией монтмориллонита. Монтмориллонит (ММ) — это слоистый алюмосиликат, представляющий собой трёхслойный пакет (2:1): два слоя кремнекислородных тетраэдров, обращённые вершинами друг к другу, с двух сторон покрывают слой алюмогидроксильных октаэдров [2].

Для исследования использовали: а) немодифицированный ММ, б) ММ, модифицированный катионным ПАВ, в) ММ, модифицированный наночастицами Fe_3O_4, г) ММ, модифицированный и катионным ПАВ, и наночастицами Fe_3O_4. Синтез сорбентов производили по методикам, описанным в работе [2].

ММ: Fe_3O_4:ПАВ показал лучшую степень сорбции Sb (III) по сравнению с другими вариантами сорбента. Определены оптимальные условия сорбции:

диапазон pH 4–10, масса сорбента – 0,4 г на 25 мл раствора с концентрацией сурьмы 10 мг/л, время сорбции 90 мин. При оптимальных условиях степень сорбции сурьмы из раствора концентрацией 10 мг/л достигает более 95%. Были построены изотермы сорбции, которые были обработаны с использованием моделей Фрейндлиха и Ленгмюра. Установлено, что для описания процесса сорбции Sb (III) на сорбенте ММ+ПАВ+Fe_3O_4 лучше подходит модель Фрейндлиха.

1. Ungureanu G., Santos S., Boaventura R., Botelho C. Arsenic and antimony in water and wastewater: Overview of removal techniques with special reference to latest advances in adsorption, J. Environ. Manage. -2015. - V.151. – P. 326–342.
2. Ordinartsev, D. P., Pechishcheva, N. V., Estemirova, S. K., Kim, A. V., Shunyaev, K. Y. Removal of Cr (VI) from wastewater by modified montmorillonite in combination with zero-valent iron // Hydrometallurgy. - 2022. - V. 208. – P. 105813

ИНДУЦИРОВАННЫЕ ШУМАМИ ПЕРЕХОДЫ МЕЖДУ РАВНОВЕСНЫМИ И ОСЦИЛЛЯЦИОННЫМИ РЕЖИМАМИ В МОДЕЛИ ТЕРМОХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ

Клабукова Ю.В.[1], Башкирцева И.А.[1]
[1)] Кафедра теоретической и математической физики Уральского Федерального университета
E-mail: uvklabukova@gmail.com

NOISE-INDUCED TRANSITIONS BETWEEN EQUILIBRIUM AND OSCILLATORY REGIMES IN A MODEL OF THERMOCHEMICAL KINETICS

Klabukova Y.V.[1], Bashkirtseva I.A.[1]
[1)] Department of Theoretical and Mathematical Physics of the Ural Federal University

A bifurcation analysis for the thermochemical model has been carried out. A classification of possible attractors is obtained, and coexistence zones are described. Stochastic transitions between attractors are investigated.

В данной работе рассматривается нелинейная модель Ариса-Амундсена, описывающая динамику изменения концентрации и температуры реагента в термохимической реакции. Проведён бифуркационный анализ детерминированной модели и получены параметрические описания локальных и глобальных бифуркаций, проведена классификация возможных аттракторов. Найдены области мультистабильности с сосуществованием как равновесных, так и осцилляторных аттракторов, с локализацией сепаратрис, разделяющих их бассейны притяжения. Данные результаты детерминированного анализа играют важную роль в исследовании механизмов индуцированных шумом переходов между аттракторами. Для параметрических зон мультистабильности получено описание индуцированных шумами переходов между сосуществующими равновесными и осцилляционными режимами с привлечением как методов прямого численного моделирования решений стохастических моделей, так и аналитического подхода, использующего технику доверительных областей.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда №23-21-00042

1. В.В. Васин, Л.Б. Ряшко. Элементы нелинейной динамики: от порядка к хаосу, Издательство Уральского университета (2003)
2. М. Холодниок, А. Клич, М. Кубичек, М. Марек. Методы анализа нелинейных динамических систем, Москва «Мир» (1991)

ИССЛЕДОВАНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ПОЛИВИНИЛПИРРОЛИДОН-ИОДА В ПОЛЕ НИЗКОЧАСТОТНЫХ ВИБРОАКУСТИЧЕСКИХ ВОЗДЕЙСТВИЙ

Кокорин Н.А.[1], Пентюхин Е.И.[1, 2], Богатов Н.А.[1, 2], Зоткин А.П.[1, 2], Савина А.С.[1, 2], Халаджан Е.А.[2]

[1)] Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия

[2)] Инжиниринговый центр «Автоматика и робототехника» МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Россия

E-mail: nkokorin074@gmail.com

INVESTIGATION OF THE SPECTRAL CHARACTERISTICS OF POLYVINYLPYRROLIDONE-IODINE IN THE FIELD OF LOW-FREQUENCY VIBROACOUSTIC OSCILLATIONS

Kokorin N.A.[1], Pentyukhin E.I.[1, 2], Bogatov N.A.[1, 2], Zotkin A.P.[1, 2], Savina A.S.[1, 2], Khaladzhan E.A.[2]

[1)] Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia

[2)] Engineering Center «Automation and Robotics» of Bauman MSTU, Moscow, Russia

The change in the optical density spectrum of povidone-iodine in the field of low-frequency oscillations was studied. A conclusion about the dissociation of the complex under the action of infrasound is made. Partially confirmed data on the structure of the complex.

Супрамолекулярные комплексы иода (в частности клатраты) претерпевают изменение в поле низкочастотных виброакустических воздействий. Клатратные комплексы иод-крахмал и ПВС-иод, применяемые в медицине в качестве йодофоров, необратимо диссоциируют под действием инфразвука, что часто объясняют энергетическим состоянием связанного иода. Некоторые исследователи предполагают, что в дальнейшем эту особенность можно будет использовать для противодействия негативному влиянию инфразвука на человеческий организм [1].

В настоящей работе рассматриваются особенности поведения в виброакустическом поле хелатного комплекса поливинилпирролидон-иод (также повидон-иод, иод-ПВП). Данное соединение широко применяется в медицине в качестве антисептика, так как содержит связанный иод, способный медленно высвобождаться и взаимодействовать с клетками грибков и бактерий, не травмируя ткани человека.

Экспериментальная установка [2, 3] состоит из линейного колебательного контура и фторопластового вибропоршня, передающего виброакустические колебания в систему. Озвучивание проводилось при частоте 15 Гц и амплитуде колебаний 2,2 см. Измерения оптической плотности системы проводилось на

спектрофотометре Юнико 1021 в диапазоне длин волн от 320 до 800 нм с шагом 5 нм.

Рассматриваемое соединение весьма неустойчиво, сильно подвержено воздействию света и температуры. Для учёта этого фактора приготовленный раствор ПВП-иода с содержанием 5мг/мл был разделён на три части. Спектр одной из них (контрольный раствор) снимался сразу после приготовления. Две другие части анализировались одновременно, после озвучивания одного из образцов в течение часа. Спектры всех трёх растворов представлены на рисунке 1.

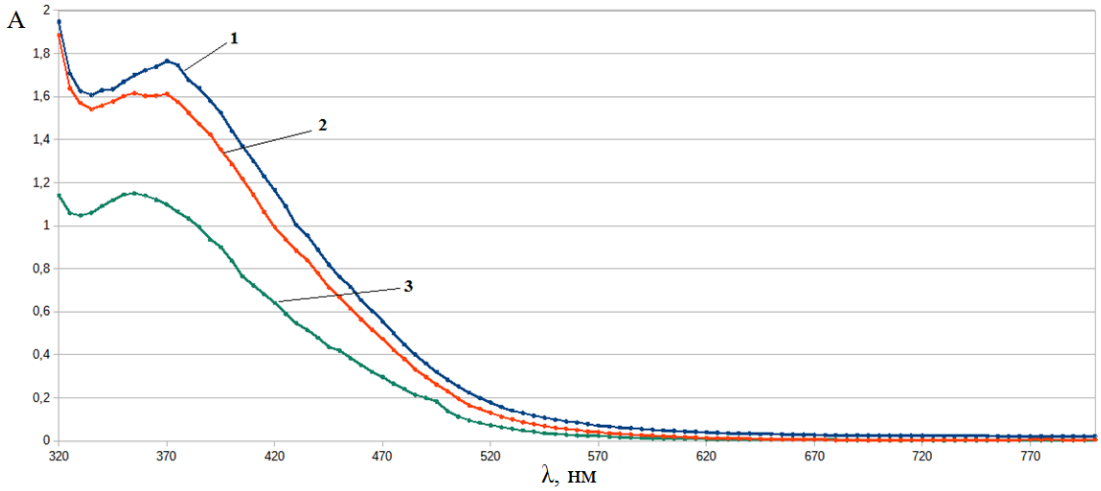


Рис. 1. Изменение спектра оптической плотности ПВП-иода: 1 – контрольный раствор, 2 – неозвученный образец, 3 – озвученный образец.

На графиках можно увидеть выраженный максимум в пределах длин волн от 350 до 370 нм. В соответствии с экспериментальными данными [4] данный пик вполне вероятно соответствует трииодид иону I_3^- (~355 нм). В работе [5] на основе анализа ИК-спектров предложено строение комплекса иод-ПВП, включающее локализованный при атоме азота трииодид-ион, что может выполняться при протонировании кето-группы вследствие диспропорционирования молекулярного иода в водном растворе.

Выраженное снижение оптической плотности в районе $\lambda = 355$ нм указывает на то, что в поле низкочастотных акустических колебаний комплекс диссоциирует подобно упомянутым ранее клатратам. При этом по-прежнему сложно сказать, в какую форму переходит молекулярный иод. Логично было бы предположить, что при высвобождении из комплекса с ПВП иод будет связываться с водой в новый комплекс, имеющий максимум поглощения в районе $\lambda = 460$ нм. Тем не менее в ходе опыта локального максимума при данной длине волны не наблюдалось, в связи с чем полученные данные требуют уточнения и дальнейшего изучения. Стоит отметить, что представленный результат доказывает, что диссоциация клатратных комплексов иода не является

уникальным свойством супрамолекулярных структур и присуща также хелатным комплексам.

1. Фадеев, Г. Н. Клатраты йода – прототипы антидотов против акустического нелетального оружия / Г. Н. Фадеев, В. С. Болдырев, В. Н. Тверитинов, Л. И. Пашкова // Вестник МГТУ им. Н. Э. Баумана. Сер. “Естественные науки”. – 2013. – Вып. 1. – С. 82-88. – ISSN 1812-3368/
2. Патент № 206891 Российская Федерация, МПК B01J 19/08. Устройство для интенсификации химических процессов в жидкой среде : № 2021111178 : заявлено 20.04.2021 : опубликовано 30.09.2021, Бюл. № 28 / Меньшиков В. В., Болдырев В. С., Богатов Н. А., Ветрова О. Б., Савина А. С., Зоткин А. П., Фадеев Г. Н., Кузнецов Н. Н. ; патентообладатель Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева. – 8 с.
3. Патент № 213619 Российская Федерация, МПК B01J 19/08. Устройство для интенсификации химических процессов в жидкой среде : № 2022111486 : заявлено 27.04.2022 : опубликовано 19.09.2022, Бюл. № 26 / Богатов Н. А., Болдырев В. С., Савина А. С., Зоткин А. П., Пентюхин Е. И. ; патентообладатель Московский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана. – 6 с.
4. Алукер, Н. Л. Спектрофотометрическое определение форм присутствия йода в растворах соединений йода / Н. Л. Алукер, M. Herrmann // Оптика и спектроскопия. – 2021. – Т. 129, вып. 5. – С. 659–664.
5. Мельникова, О. А. ИК-спектроскопическое изучение химической структуры полимерных комплексов лекарственных веществ на основе поливинилпирролидона / О. А. Мельникова, И. А. Самкова, М. Ю. Мельников, А. Ю. Петров, О. С. Ельцов // Успехи современного естествознания. – 2016. – № 8. – С. 42–49.

ИОННЫЙ ОБМЕН СЛОИСТЫХ ГИДРОКСИДОВ РЗЭ В КАРБОНАТНЫХ РАСТВОРАХ

Косых А.С.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
E-mail: KosykhAnastasiya@yandex.ru

ION EXCHANGE OF LAYERED REE HYDROXIDES IN CARBONATE SOLUTIONS

Kosykh A.S.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

In this work, anion exchange of precipitates of layered GdEr hydroxides was carried out in the medium of NH4CO3 solutions. The influence of the pH value of synthesis, the degree of hydration, and the content of carbonate ions on the properties of layered GdEr hydroxide nitrates is shown.

Соединения, имеющие в своем составе редкоземельные элементы, представляют интерес для многих применений. Так, например, слоистые гидроксиды редкоземельных элементов (СГ РЗЭ) исследуются в качестве перспективных катализаторов [1], чувствительных сенсоров ионов [2], прозрачной магнитооптической керамики [3], фотолюминесцентных материалов [4] и т. д. Неотъемлемым свойством СГ РЗЭ является их склонность к анионному обмену [5]. Представляет интерес исследование ионообменных свойств этих соединений и наблюдение за изменением их характеристик в ходе этого процесса. В работе исследовано влияние концентрации карбонат-ионов на свойства СГ GdEr в суспензии.

Для исследования были получены СГ Gd с добавкой 1 моль. % Er из 0,5 М нитратных растворов Gd и Er с использованием 5 %-ого раствора NH_4OH в качестве осадителя. Синтез проводился методом контролируемого двухструйного осаждения при pH = 7,0 и 8,0 ед. при 30 °С и постоянном перемешивании с последующими операциями фильтрации и промывки. С целью установления влияния степени гидратированности осадка и процесса его старения в ходе частичной дегидратации на внедрение карбонат-ионов в структуру влажный осадок разделен на две части: отмытую влажную и отмытую и высушенную при 50 °С в течении 24 ч. Ионный обмен проводился следующим образом: помещение навески в растворы NH_4CO_3 с концентрациями $6 \cdot 10^{-5}$; 0,05; 0,1; 1 М, выдержка в течение 7 сут., фильтрация, промывка и сушка при 50 °С 24 ч. Свойства продуктов исследованы при помощи методов лазерной и рентгеновской дифракции, оптической микроскопии и ИК-Фурье-спектроскопии.

Результаты ИК-спектроскопии показали, что просушивание осадков СГ GdEr при 50 °С приводит к увеличению содержания карбонат-ионов. Увеличение значения pH осаждения также приводит к увеличению степени карбонитизации осадков. По результатам рентгеновской дифракции структура просушенных осадков СГ GdEr до проведения ионного обмена идентифицирована как слоистый гидроксонитрат $Gd_2(OH)_5NO_3 \cdot nH_2O$. При обработке СГ GdEr растворами, содержащими карбонат-ионы в концентрации $6 \cdot 10^{-5}$, 0,05 и 0,1 М, наблюдается разупорядочение стыковки слоев. Обработка 1 М раствором приводит к превращению фазы в новую, которую, предположительно, можно отнести к фазе слоистых карбонат-аммонийных соединений РЗЭ состава $(NH_4)_xMe(OH)_y(CO_3)_z*nH_2O$. Стоит отметить, что с увеличением значения pH синтеза в ходе осаждения СГ GdEr перестройка гидроксонитратной фазы в карбонат-аммонийную интенсифицируется, причем влажные осадки трансформируются легче частично дегидратированных. Оптические изображения демонстрируют, что образование и рост кристаллов карбонат-аммонийных соединений РЗЭ протекает непосредственно на поверхности сфероидных агломератов слоистых частиц, что сопровождается резким уменьшением диаметра последних.

Полученные данные могут быть полезны при управлении анионнообменными процессами в структуре СГ РЗЭ и свойствами конечного слоистого продукта.

Данная работа выполнена при поддержке совета по грантам Президента Российской Федерации СП-2022.

1. GaÂ ndara, J.Perles, N.Snejko, M.Iglesias, B.GoÂ mez-Lor, E.GutieÂrrez-Puebla, M.AÂ .Monge. Angew. Chem., Int. Ed., 45, 7998 (2006).
2. H.Kim, B.I.Lee, S.H.Byeon. Chem. Commun., 51, 725 (2015).
3. Lu, B.; Wu, S.; Cheng, H.; Ye, R.; Cai, X.; Wang, M.; Wang, Y. Binary Transparent (Ho1-xDyx)2O3 Ceramics: Compositional Influences on Particle Properties, Sintering Kinetics and Faraday MagnetoOptical Effects. J. Eur. Ceram. Soc. 2021, 41, 2826−2833.
4. Wu, X.; Li, J.-G.; Ping, D.-H.; Li, J.; Zhu, Q.; Li, X.; Sun, X.; Sakka, Y. Structure Characterization and Photoluminescence Properties of (Y0.95−xGdxEu0.05)2O3 Red Phosphors Converted from Layered Rare-Earth Hydroxide (LRH) Nanoflake Precursors. J. Alloys Compd. 2013, 559, 188−195.
5. Geng, F., Xin, H., Matsushita, Y., Ma, R., Tanaka, M., Izumi, F., … Sasaki, T. (2008). New Layered Rare-Earth Hydroxides with Anion-Exchange Properties. Chemistry - A European Journal, 14(30), 9255–9260.

ОКИСЛИТЕЛЬНОЕ РАЗЛОЖЕНИЕ КАТИОНИТА КУ-2×8 И АНИОНИТА АВ-17×8 ВОДНЫМ РАСТВОРОМ ПЕРОКСИДА ВОДОРОДА

Козлова М.М.[1], Марков В.Ф.[1, 2], Маскаева Л.Н.[1, 2]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Уральский институт Государственной противопожарной службы МЧС России, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: marina.kozlova2014@mail.ru

OXIDATIVE DECOMPOSITION OF CATION-EXCHANGE RESIN KU-2×8 AND ANION-EXCHANGE RESIN AV-17×8 WITH AN AQUEOUS SOLUTION OF HYDROGEN PEROXIDE

Kozlova M.M.[1], Markov V.F.[1, 2], Maskaeva L.N.[1, 2]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia
[2)] Ural State Fire Service Institute of Emergency Ministry of Russia, Yekaterinburg, Russia

Kinetic studies of the oxidation of AV-17×8 anion exchanger and KU-2×8 cation exchanger with hydrogen peroxide have been carried out. The effect of the process temperature, hydrogen peroxide concentration, and type of catalyst on the rate of oxidation of ion-exchange resins has been studied.

Ионообменные смолы катионит КУ-2×8 и анионит АВ-17×8 широко применяют для очистки сточных и промывных вод на отечественных атомных электростанциях. На предприятиях атомной энергетики существует проблема утилизации значительных количеств пульп малоактивных отработанных ионообменных смол. В настоящее время традиционными методами переработки отработанных ионообменных смол являются иммобилизация, термическая обработка, сушка, окисление в сверхкритических условиях. Однако, например, при цементировании ионообменных смол происходит увеличение объема отходов, при сверхкритическом окислении образуются вторичные радиоактивные отходы, а в процессе сушки конечный продукт способен впитывать влагу [1].

Перспективной технологией утилизации ионообменных смол может быть процесс Фентона, который основан на разложении органических веществ под действием пероксида водорода H_2O_2. В результате реакции Фентона генерируется реакционно способный гидроксильный радикал $^{\bullet}OH$ с окислительно-восстановительным потенциалом 2.8 В. Катализатором процесса являются ионы переходных металлов, в частности железа(II), железа(III) и меди(II) [2].

В настоящей работе проведены кинетические исследования окислительной деструкции ионообменных смол катионита КУ-2×8 и анионита АВ-17×8 с использованием реакции Фентона.

Каталитическую окислительную деструкцию катионита КУ-2×8 20 об% пероксидом водорода с добавлением 0.001 – 0.009 моль/л катализаторов сульфата железа(II), хлорида железа(III), нитрата железа(III) и сульфата меди(II) проводили в диапазоне температур 323 – 353 К. Установлено, что наиболее сильное окислительное действие на процесс разложения катионита оказывают соли железа(II, III) по сравнению с сульфатом меди(II) (рис. 1).

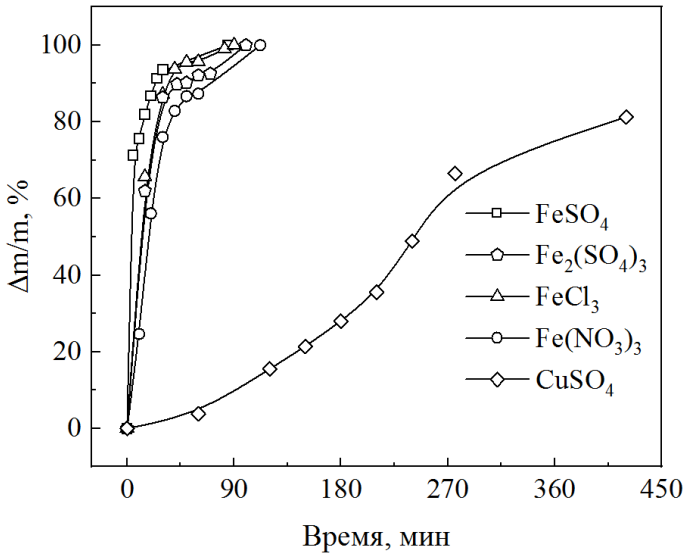


Рис. 1. Кинетические кривые относительной убыли массы катионита КУ-2×8 в 20 об.% пероксиде водорода при 333 К

Окислительное разложение анионита АВ-17×8 20 об% пероксидом водорода с добавлением 0.001 – 0.005 моль/л катализаторов сульфата меди(II), хлорида меди(II), нитрата меди(II) и сульфата железа(II) проводили при температуре 323-348 К. Установлено, что соли меди(II) активнее растворяют смолу, чем соли железа(II, III).

Вычисленные значения энергии активации окислительного разложения катионита характерны для процесса, протекающего в кинетической области. С добавлением $CuSO_4$ значения энергии активации составляют 89.7 – 115.2 кДж/моль. В присутствии $FeSO_4$, $Fe_2(SO_4)_3$, $FeCl_3$, $Fe(NO_3)_3$ значения энергии активации несколько ниже и составляют 40.9 – 67.1, 50.3 – 78.7, 55.3 – 73.1, 68.9 – 81.0 кДж/моль соответственно. После упаривания полученного водно-органического раствора и последующей сушке в электропечи остаточная масса катионита составила около 38 %, анионита – примерно 11 %. Полученный остаток в последующем может быть отвержден по известным технологиям.

1. М.И. Смольников, В.Ф. Марков, Л.Н. Маскаева, А.Е. Бобылев и О.А. Мокроусова, Бутлер. сообщения. Т. 49, № 3, 119–134 (2017).
2. M-H. Zhang, H. Dong, L. Zhao, D-X. Wang, D. Meng, Sci. Total Environ. V. 670, 110–121 (2019).

СТРУКТУРИРОВАНИЕ РЕЦЕПТОРНОГО СЛОЯ СЕНСОРА НА ХЛОРАМФЕНИКОЛ ПОСРЕДСТВОМ ЭЛЕКТРООСАЖДЕНИЯ 3,6-БИС(ЭТИНИЛ)-9Н-КАРБАЗОЛА

Козырина Ю.В.[1], Зайдуллина Р.А.[1], Свалова Т.С.[1], Вербицкий Е.В.[1], Матерн А.И.[1], Козицина А.Н.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
E-mail: Iu.Kozyrina@yandex.ru

STRUCTURING OF THE SENSOR RECEPTOR LAYER TO CHLORAMPHENICOL BY ELECTRODEPOSITION OF 3,6-BIS(ETHYNYL)-9H-CARBAZOLE

Kozyrina Yu.V.[1], Zaidullina R.A.[1], Svalova T.S.[1], Verbitskiy E.V.[1], Matern A.I.[1], Kozitsina A.N.[1]
[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia

In this work, the approach to structuring the receptor layer of the glassy carbon electrode by electropolymerization of 3,6-bis(ethynyl)-9H-carbazole through the acetylene fragment has been proposed. The use of immobilized molecule as an agent for selective detection of chloramphenicol was evaluated

Хлорамфеникол – антибиотик, широко используемый в ветеринарии и медицине –однако его накопление в организме способно вызвать необратимые нарушения работы внутренних органов [1]. Поэтому актуально развитие портативных электрохимических сенсорных устройств для определения следовых количеств хлорамфеникола в объектах окружающей среды и продуктах питания. Перспективной заменой рецепторам биологической природы (антителам и аптамерам) могут стать синтезированные малые органические молекулы, благодаря их низкой стоимости и широким возможностям направленного органического синтеза соединений с заданными свойствами. Так, по результатам ранее проведенных исследований производные карбазола продемонстрировали наивысшую комплементарность к хлорамфениколу (K_{sv}=105 425 M^{-1}) и потому были выбраны нами в качестве перспективных элементов молекулярного распознавания.

Целью данной работы являлось структурирование рецепторного слоя электрохимического сенсора посредством электрополимеризации 3,6-бис(этинил)-9Н-карбазола на поверхности стеклоуглеродного электрода (СУЭ).

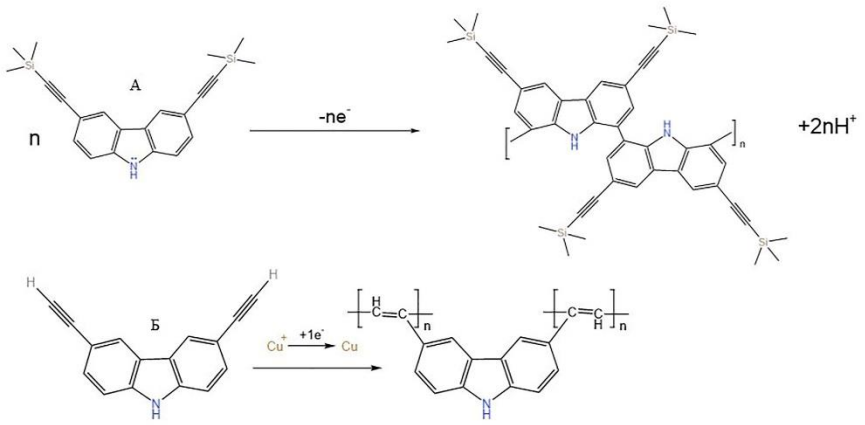


Рис. 1. Предполагаемые схемы электрополимеризации ацетилен-производных А – 3,6-бис((триметилсилил)этинил)-9Н-карбазола; Б – 3,6-бис(этинил)-9Н-карбазола.

В ходе работы предложены два подхода к электроосаждению карбазол-содержащих функциональных слоев, представленные на рисунке 1. Характеристика электроосажденных модификаторов осуществлялась посредством регистрации циклических вольтамперограмм и годографов импеданса в координатах Найквиста в системе $[Fe(CN)_6]^{4-/3-}$. При осуществлении первого подхода – полимеризации молекулы А по карбазольному фрагменту – после одного цикла полимеризации сигнал системы гексацианоферрата снизился на 55% относительно сигнала немодифицированного стеклоуглеродного электрода, а сопротивление переносу заряда увеличилось в 4 раза. В случае полимеризации по ацетиленовому фрагменту снижение сигнала в системе $[Fe(CN)_6]^{4-/3-}$составило 12% после 1 цикла полимеризации относительно чистого СУЭ, сопротивление переносу заряда увеличилось незначительно.

Таким образом, наиболее перспективным способом структурирования рецепторного слоя является электроосаждение 3,6-бис(этинил)-9Н-карбазола по ацетиленовому фрагменту. В ходе работы также была оценена возможность применения иммобилизованной молекулы в качестве агента самостоятельного распознавания в конструкции электрохимического сенсора для селективного определения хлорамфеникола.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта МК-392.2022.1.3

1. Sarmah A.K. et al., Chemosphere, 65, pp. 725-759, (2006)

ИЗВЛЕЧЕНИЕ РЕНИЯ И МОЛИБДЕНА ИЗ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ ПУТЕМ СОРБЦИИ НА МОДИФИЦИРОВАННОМ МОНТМОРИЛЛОНИТЕ

Коробицына А.Д.[1, 2], Крутикова Е.А.[2], Печищева Н.В.[1], Ординарцев Д.П.[1]
[1)] Институт металлургии УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: li912@list.ru

EXTRACTING RHENIUM AND MOLYBDENUM FROM AQUEOUS SOLUTIONS VIA ADSORPTION ON MODIFIED MONTMORILLONITE

Korobitsyna A.D.[1, 2], Krutikova E.A.[2], Pechishcheva N.V.[1], Ordinartsev D.P.[1]
[1)] Institute of Metallurgy of UB RAS, Yekaterinburg, Russia
[2)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

A high degree of adsorption of Re(VII) and Mo(VI) on MM:CS and MM:Fe3O4, respectively, was achieved. It is shown the difference in the adsorption of Mo(VI) and Re(VII) on the initial montmorillonite. Alternate desorption of Mo(VI) and Re(VII) from the MM surface was proposed.

Основными источниками получения рения являются молибденовые руды и продукты их переработки. Такие факторы, как низкая концентрация рения в руде и концентрате, а также наличие мешающих макрокомпонентов (в основном – молибдена), затрудняют извлечение рения из растворов. Исследована возможность извлечения рения(VII) и молибдена(VI) из водных растворов путем сорбции на высокодисперсном слоистом алюмосиликате – монтмориллоните (ММ) и возможность их разделения. Также была изучена сорбция этих ионов на ММ после его модификации частицами магнетита и/или катионным поверхностно-активным веществом (ПАВ) в соответствии с методикой, описанной в [1]. Полученные образцы обозначены как ММ:Fe_3O_4, ММ:ПАВ и ММ:Fe_3O_4:ПАВ.

Показано, что модификация монтмориллонита катионным поверхностно-активным веществом улучшает сорбционные характеристики сорбента по отношению к ионам рения (VII). Так, при перемешивании раствора с сорбентом в течение 1 часа с концентрацией рения 10 мг/л в диапазоне pH от 3.2 до 6.3 (среда ацетатного буферного раствора) степень сорбции рения на ММ не превышает 84%, тогда как на ММ:ПАВ она составляет свыше 99%. Для молибдена (VI) в аналогичных условиях степень сорбции увеличивается на 86% при pH 6.3 при использовании ММ:Fe_3O_4 в сравнении с исходным ММ.

Найдены условия, при которых была достигнута максимальная разница в поведении сорбции молибдена (VI) и рения (VII) - 79%: сорбент – исходный ММ, pH 6.3, среда ацетатного буфера.

Была исследована десорбция молибдена(VI) и рения(VII) с поверхности ММ. В качестве десорбентов были выбраны 2 М NaOH, при использовании которого степень десорбции Mo(VI) составила 96%, Re (VII) – 1%, и изопропанол – 99% десорбции Re (VII) против 34% Mo (VI).

Таким образом, модифицированный монтмориллонит перспективен для максимального извлечения (свыше 99%) молибдена (VI) и рения (VI). Свойства исходного ММ позволяют найти условия, которые могут быть положены в основу метода разделения Re (VII) и Mo (VI).

Работа выполнена по Государственному заданию ИМЕТ УрО РАН и при финансовой поддержке Министерства наук и высшего образования РФ в рамках Программы развития УрФУ («Приоритет-2030»).

1. Removal of Cr(VI) from wastewater by modified montmorillonite in combination with zero-valent iron, Ordinartsev D. P., Pechishcheva N. V., Estemirova S. Kh., Kim A. V., Shunyaev K. Yu., Hydrometallurgy, V. 208, P. 105813 (2022)

ВЛИЯНИЕ СКОРОСТИ ПОТОКА ГАЗА-НОСИТЕЛЯ НА МЕТРОЛОГИЧЕСКИЕ ПОКАЗАТЕЛИ ПРИ ОПРЕДЕЛЕНИИ СОДЕРЖАНИЯ КИСЛОРОДА МЕТОДОМ ВОССТАНОВИТЕЛЬНОГО ПЛАВЛЕНИЯ

Кутовой М.Ю.[1, 2], Масленникова А.А.[2]
[1)] Уральский Федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина
[2)] Институт высокотемпературной электрохимии Уральского отделения РАН
E-mail: mkutovoy544@mail.ru

THE EFFECT OF THE CARRIER GAS FLOW RATE ON METROLOGICAL INDICATORS IN DETERMINING THE OXYGEN CONTENT BY THE METHOD OF REDUCING MELTING

Kutovoy M.Y.[1, 2], Maslennikova A.A.[2]
[1)] Ural Federal University
[2)] Institute of Hight Temperature Electrochemistry

In this paper, the effect of helium consumption in the determination of oxygen by the method of reducing melting on metrological indicators is investigated. The most effective helium consumption in determining trace amounts of oxygen was equal to 25 l/h.

На сегодняшний день контроль кислорода методом восстановительного плавления получил большое распространение в различных системах [1]. Один из важнейших параметров анализа данным методом – скорость потока газа-носителя, который может оказывать влияние на метрологические показатели результатов. Целью настоящей работы было выявить зависимость чувствительности, предела обнаружения и СКО от скорости потока газа-носителя.

Были проанализированы стандартные образцы железа (Iron Powder 501-702) с содержанием кислорода □(O)=1.10 ± 0.02% при скоростях потока газа-носителя 11, 25 и 47 л/ч. Измерения содержания кислорода проводились с использованием анализатора МЕТАВАК-АК методом восстановительного плавления в токе газа-носителя, основанным на взаимодействии кислорода пробы с углеродом тигля при высоких температурах. В результате такой реакции образуется газ CO, который проходя через печь с реактивом CuO, конвертируется в CO_2 и затем выносится в измерительный блок с недисперсионным ИК-детектором. Анализ проводили при температуре 2500°C с использованием оловянных капсул. В качестве газа носителя использовали гелий.

На основе полученных результатов были получены три градуировочные зависимости в координатах «Аналитический сигнал, мВ – масса кислорода, мг» при расходах гелия 11, 25 и 47 л/ч. С увеличением скорости потока

чувствительность уменьшается, так как уменьшается угол наклона градуировочной зависимости. Также уменьшается и стандартное отклонение результатов измерения в условиях повторяемости. На основании полученных данных рассчитали пределы обнаружения кислорода при разных расходах гелия. Наименьший предел обнаружения был получен при скорости потока газа 25 л/ч, следовательно, данная скорость потока газа-носителя будет наиболее эффективной при измерении малых количеств кислорода.

1. Григорович К. В. Фракционный анализ кислорода в металлах — особенности и возможности метода / К. В. Григорович // Аналитика и контроль. (№ 2, с. 151-158, 2002 г.)
2. А.М. Вассерман, Л.Л. Кунин, Ю.Н. Суровой. Определение газов в металлах. М: Наука (1976)

ФОТОРАЗЛОЖЕНИЕ МЕТИЛЕНОВОГО СИНЕГО ПРИ УЧАСТИИ ТОНКИХ ПЛЕНОК CuS

Лысанова М.А.[1], Маскаева Л.Н.[1, 2]
[1)] Уральский Федеральный Университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина, Россия, Екатеринбург
[2)] Уральский институт ГПС МЧС России, Россия, Екатеринбург
E-mail: maria.lysanova@bk.ru

METHYLENE BLUE PHOTODEGRADATION WITH THE PARTICIPATION OF CuS THIN FILMS

Lysanova M.A.[1], Маскаева Л.Н.[1, 2]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia
[2)] Ural Institute of State Fire Service of EMERCOM of Russia, Yekaterinburg, Russia

Currently, the problem of water purification from toxic compounds is very relevant. In this paper, photocatalytic methylene blue (MB) decomposition under visible light influence in the presence of CuS is investigated.

В настоящее время проблема очистки воды от токсичных соединений весьма актуальна. В данной работе исследовано фотокаталитическое разложение метиленового синего (МС) под воздействием видимого света в присутствии CuS.

Уникальные структурные свойства, высокий коэффициент абсорбции, нетоксичность, стабильность и относительно низкая стоимость объясняют интерес к сульфиду меди (II) как к перспективному соединению для применения в фотокаталитическом разложении токсичных веществ [1-2]. Изучение адсорбции раствора метиленового синего дает ценную информацию о поверхности сорбента в фотокаталитическом процессе разложения, роль которого в настоящей работе выполняет полупроводниковый слой CuS.

Пленки сульфида меди CuS толщиной 100±10 нм с хорошей адгезией к поверхности как ситалла, так и матированного кварца получены при pH = 5.35-5.40 гидрохимическим осаждением из реакционной смеси, содержащей фиксированные концентрации водных растворов $CuSO_4$, $NaCH_3COO$ и N_2H_4CS при варьировании от 10^{-5} до 10^{-2} моль/л соли $NiCl_2$. Процесс осаждения проводили при температуре 353 K в течение 120 мин.

Для исследования фотокаталитических свойств синтезированную пленку CuS помещали в раствор органического красителя метиленового синего с концентрацией 10^{-5} моль/л. Чтобы определить степень деколоризации метиленового синего под воздействием видимого света, раствор красителя подвергали воздействию видимого света в течение 10 минут. Далее через определенные промежутки времени измеряли оптическую плотность на спектрофотометре ПЭ-5300ВИ.

Кинетические зависимости степени фотокаталитического разложения красителя от длительности облучения метиленового синего, проведенного в присутствии катализатора тонкопленочного катализатора CuS, осажденного на поверхность матированного кварца в течение 15 (2), 30 (3), 45 (4) и 60 (5) минут, приведены на рис. 1 (а). На рис. 1 (б) показаны аналогичные кинетические зависимости фоторазложения МС в присутствии тонкопленочного катализатора CuS(Ni), осажденного на ситалловые подложки из реакционной смеси, содержащей $NiCl_2$, моль/л: $5{\cdot}10^{-3}$ (2), 10^{-3} (3), $5{\cdot}10^{-4}$ (4), 10^{-4} (5), 10^{-5} (6), 0 (7). Степень разложения метиленового синего снижается с увеличением концентрации хлорида никеля, следовательно, легирование никелем не привело к увеличению фотоактивности катализатора.

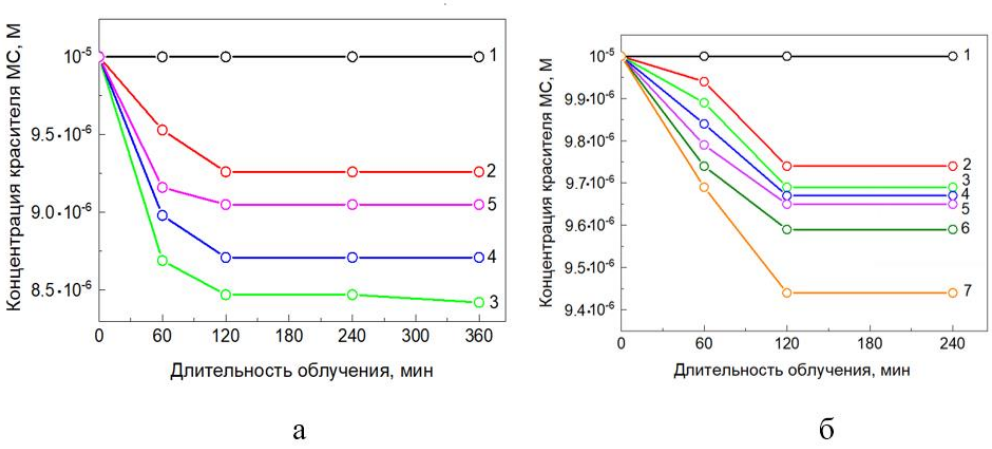


Рис. 1. Кинетические кривые фоторазложения красителя МС от длительности его облучения: (а) без катализатора (1), в присутствии катализатора CuS, химически осажденного на матированный кварц (2-5); (б) без катализатора (1), в присутствии катализатора CuS(Ni), осажденного на ситалл (2-7).

Наибольшая степень деградации красителя метиленового синего достигается при использовании тонкопленочного слоя CuS, химически осажденного на подложку из матированного кварца, обладающего фотокаталитической способностью разложения метиленового синего в водной среде при воздействии видимого света на 30% выше, чем синтезированного на ситалловой подложке.

1. M. Tanveer et al. Effect of the morphology of CuS upon the photocatalytic degradation of organic dyes. (RSC Adv, Vol.4, No.108, P.63447-63456)
2. K. Vinotha, B. Jayasutha, M.J. Abel, K. Vinotha. In3+-doped CuS thin films: physicochemical characteristics and photocatalytic property. (Journal of Materials Science: Materials in Electronics, Vol.33, No.29, P.22862-22882)

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ ИНТЕРФЕЙСА НА ГЕНЕРИРУЕМЫЙ АНАЛИТИЧЕСКИЙ СИГНАЛ В МЕТОДЕ ГХ-МС

Малышев А.Н.[1], Данилов Д.А.[1], Хорькова А.Н.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
E-mail: malyshev.k1b@gmail.com

THE EFFECT OF THE INTERFACE TEMPERATURE ON THE GENERATED ANALYTICAL SIGNAL IN THE GC-MS METHOD

Malyshev A.N.[1], Danilov D.A.[1], Khorkova A.N.[1]
[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia

The effect of interface temperature on the analytical signal in the GC-MS method is investigated by the example of the analysis of a standard solution of alkanes. The obtained data allow to determine the appropriate temperature of the interface to obtain the highest analytical signal.

При создании программы анализа в методе газовой хроматомасс-спектрометрии (ГХ-МС) незначительное внимание уделяется температурам интерфейса и катода ионного источника. Влияние температуры ионного источника на аналитический сигнал (АС) было рассмотрено в работе [1]. Очень часто температуру интерфейса подбирают исходя из температуры кипения аналита, стараясь сделать ее выше во избежание возможного конденсирования [2]. Предположительно конденсирование аналитов маловероятно, так как катод ионного источника находится в вакууме, а также через интерфейс проходит газ-носитель с достаточно большой линейной скоростью. При этом необходимо отметить крайне малое количество публикаций по влиянию температуры интерфейса на генерируемый АС.

В связи с этим целью данной работы является изучение влияния температуры интерфейса на генерируемый аналитический сигнал в методе ГХ-МС на примере анализа нормальных алканов ($C_{12}H_{26}$, $C_{13}H_{28}$, $C_{15}H_{32}$, $C_{16}H_{34}$, $C_{17}H_{36}$).

Анализ проводился на хроматографе Perkin Elmer Clarus 600 с масс-спектрометром Perkin Elmer Clarus 600T, капиллярная колонка Elite-5MS (30 м, 0,25 мм, 0,25 мкм). Программа хроматографирования: температура инжектора 250 °C, термостат – 50 °C с дальнейшим увеличением температуры до 250 °C со скоростью 10 °C, температура катода – 200 °C. Температура интерфейса устанавливалась и проверялась в диапазоне 200-300 °C с шагом в 25 °C. Был приготовлен стандартный раствор алканов в гексане, концентрация 25 мкг/г.

По результатам анализов было выявлено, что с увеличением температуры интерфейса происходит уменьшение высоты и площади пиков. Также замечено,

что время удерживания пиков увеличивается тем больше, чем больше температура интерфейса (рисунок 1).

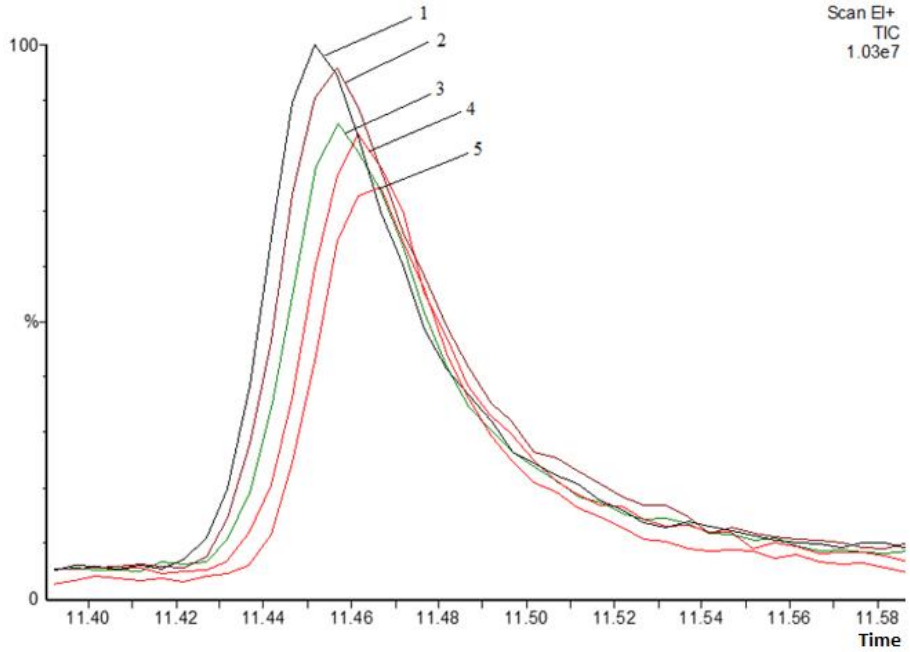


Рис. 1. Увеличенные и наложенные друг на друга пики додекана ($C_{12}H_{26}$) при различной температуре интерфейса: 1) 200°C; 2) 225°C; 3) 250°C; 4) 275°C; 5) 300 °C

В дальнейшем планируется провести анализы высококипящих (с поздним элюированием) соединений, например, полиароматических углеводородов.

1. Prest H., Thomson C. The 5973N inert MSD: Using Higher Ion Source Temperatures // Agilent Technologies, Inc. 2004. P. 1-8.
2. Lovestead T.M., Urness K.N. Gas Chromatography-Mass Spectrometry // ASM International. 2019. P. 1-16.

ГИДРОФТОРИДНАЯ ПЕРЕРАБОТКА ТЕХНОГЕННЫХ ОТХОДОВ С ПОЛУЧЕНИЕМ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Медянкина И. С.[1], Пасечник Л.А.[1]
[1)] ФГБУН Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, Россия
E-mail: lysira90@mail.ru

HYDROFLUORIDE PROCESSING OF INDUSTRIAL WASTE TO OBTAIN FUNCTIONAL MATERIALS

Medyankina I.S.[1], Pasechnik L.A.[1]
[1)] Institute of Solid State Chemistry, Ural Branch, Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia

A method for producing amorphous silica from silicon-containing industrial waste is proposed. The precipitated silica gel was tested as a carrier of the chromaticity phase of pigments and for the production of photoactive layered cobalt hydroxysilicate.

В современном мире переработка техногенных отходов является одной из важнейших задач при решении экологических и экономических проблем металлургической промышленности. Содержание оксида кремния в отходе глиноземного производства – красном шламе может достигать 30%, в ХММС процесса обогащения титаномагнетитовой руды 50%, что существенно затрудняет качественное разделение компонентов. В то же время SiO_2 является необходимым материалом, например, для производства сплавов, керамики, резинотехнических и электронных изделий [1]. Вскрытие многокомпонентных силикатных систем техногенного сырья при фторировании для получения аморфного кремнезема и функциональных материалов является нашей целью.

Выщелачивание техногенного сырья проводили 1-30% раствором гидрофторида аммония с переводом кремния в раствор в виде $(NH_4)_2SiF_6$ с последующим аммиачным гидролизом и осаждением кремнегеля. По реакции гидролитического разложения ГФСА раствором аммиака при pH 8-9 и температуре 25°С можно получить аморфный кремнезем высокой чисты со сферической формой частиц. Средний размер частиц агломератов составляет 100 нм, удельная площадь поверхность достигает 370 $м^2/г$. Примесными компонентами являются ультрамелкодисперсные золи малорастворимых соединений кальция, железа, алюминия, титана, циркония, оставшихся в кремнийсодержащем растворе после разделения пульпы. Было установлено, что с ростом концентрации реагента до 40 масс.% извлечение кремния увеличивается в 5 раз. Увеличение температуры при концентрации 10 масс. % за 4 ч повышает вскрываемость в 3 раза. Продолжительность процесса на извлечение практически не влияет. Основным преимуществом гидрофторидного метода является возможность регенерации реагента.

Получение пигментов ярко-синего $CoAl_2O_4$ и сиреневого Co_2SiO_4 цвета, в которых SiO_2 используется в качестве носителя цветоносной фазы, проводили путем пропитки влажного кремнегеля растворами формиата кобальта или смеси формиатов алюминия и кобальта. Формирование силиката Co_2SiO_4 и алюмината $CoAl_2O_4$ в продуктах отжига на фоне SiO_2 установлено при температурах 800-1100°C. Подобные материалы, благодаря развитой поверхности, будут способствовать равномерному распределению цветового компонента.

Кремнезем был использован в качестве носителя фотоактивного слоистого гидроксосиликата кобальта $Co_3(Si_2O_5)_2(OH)_2$ (рисунок 1). При этом содержание всего 0,2-3 масс.% обеспечивает разложение гидрохинона за 14 часов по действием УФ-света на 80%. Фотокаталитическая активность воспроизводилась в течение не менее 3-х циклов без деградации и вымывания кобальта из матрицы SiO_2 [2].

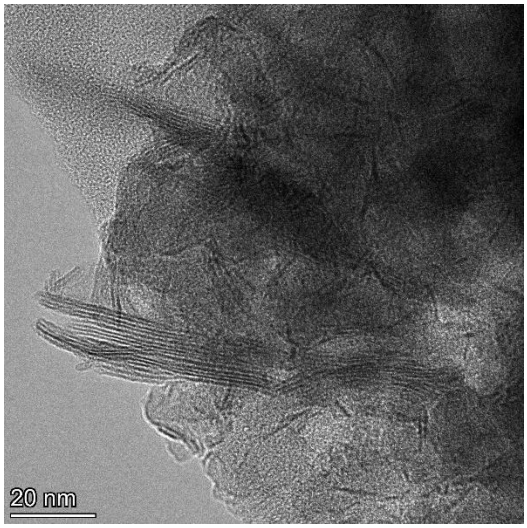


Рис. 1. Изображение Co3(Si2O5)2(OH)2 на основе SiO2, полученного из техногенных отходов.

Работа выполнена в соответствии с государственным заданием и планами научно-исследовательских работ ИХТТ УрО РАН.

1. Synthesis and characterization of nanosized-silica gels formed under controlled conditions/ Nuchanaporn Pijarn, Angkhana Jaroenworaluck, Weerawan Sunsaneeyametha, Ron Stevens // Powder Technology. 2010. Vol. 203. P. 462-468. https://doi.org/10.1016/j.powtec.2010.06.007
2. Медянкина, И. С. Формирование гидроксосиликата кобальта в матрице аморфного кремнезема / И. С. Медянкина, К. И. Светлакова, Л. А. Пасечник // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 2022. № 14. С. 800-810. https://doi.org/10.26456/pcascnn/2022.14.800.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ МНОГОКРАТНОГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ТИОКАРБАМОИЛИРОВАННОГО ПОЛИЭТИЛЕНА ДЛЯ СОРБЦИИ ИОНОВ СЕРЕБРА ИЗ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СИСТЕМ

Мельник Е.А.[1, 2], Холмогорова А.С.[2], Крылатова Е.Е.[2], Неудачина Л.К.[2], Пестов А.В.[2, 3]

[1)] УНИИМ – филиал ФГУП «ВНИИМ им.Д.И.Менделеева»

[2)] ФГАОУ ВО «УрФУ имени первого Президента России Б. Н. Ельцина»

[3)] Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского Уральского отделения Российской академии наук

E-mail: ea-melnik@mail.ru

STUDY OF THE POSSIBILITY OF MULTIPLE USE OF THIOCARBAMOYLATED POLYETHYLENE FOR THE SORPTION OF SILVER IONS FROM MULTICOMPONENT SYSTEMS

Melnik E.A.[1, 2], Kholmogorova A.S.[2], Krylatova E.E.[2], Neudachina L.K.[2], Pestov A.V.[2, 3]

[1)] UNIIM - Affiliated Branch of the D. I. Mendeleyev Institute for Metrology

[2)] Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin

[3)] I. Ya. Postovsky Institute of Organic Synthesis of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences (IOS UB RAS)

In this work, we studied the possibility of repeated use of thiocarbamoylated polyethylene for the sorption of silver ions from multicomponent systems in dynamic mode at pH 1. The degree of sorption and desorption over two successive cycles is over 75%.

Использование ионов и наночастиц серебра приобретает спрос благодаря их антибактериальным свойствам [1]. Несмотря на широкую область применения серебро запрещено использовать при производстве чистящих средств, поскольку при их использовании ионы попадают в сточную воду, что может привести к нарушению микробиологической экосистемы [2]. Следовательно, возникает необходимость извлечения ионов серебра перед сливом загрязненных отходов в сточную воду [3]. Решением данной проблемы является введение дополнительной стадии концентрирования с использованием комплексообразующих сорбентов в цикл очистки.

Ранее установлено, что тиокарбамоилированный полиэтилен (ТП) проявляет селективные свойства по отношению к ионам серебра при сорбции из многокомпонентных растворов. Количественное извлечение ионов серебра реализуется в диапазоне pH от 1 до 5 [4]. Для установления пригодности сорбента для непрерывных процессов сорбции-десорбции проведен следующий эксперимент: модельный раствор с pH 1 и объемом 90,0 см, содержащий ионы: Ag^{+}, Ca^{2+}, Mg^{2+}, Ni^{2+}, Co^{2+}, Pb^{2+}, Cd^{2+}, Zn^{2+}, Mn^{2+}, Cu^{2+}, Fe^{3+} ($C=1\cdot10^{-4}$ моль/дм^3)

пропускали через концентрирующий патрон ДИАПАК, заполненный 0,1000 г сорбента со скоростью 2 $см^3$/мин. Объем пропускаемого раствора 90 $см^3$, далее проводили десорбцию серебра следующими растворами: 1 моль/$дм^3$ H_2SO_4 (10 $см^3$), 1 моль/$дм^3$ H_2SO_4 и 0,5 % тиомочевины (ТМ) (20 $см^3$); 1 моль/$дм^3$ H_2SO_4 и 1 % ТМ (10 $см^3$), 1 моль/$дм^3$ H_2SO_4 и 5,0 % ТМ (10 $см^3$). Осуществляли три последовательных цикла сорбции-десорбции. При первом цикле ионы серебра извлекались практически количественно (в первой порции (15 $см^3$) наблюдался проскок иона металла, в последующих порциях проскок отсутствовал, степень сорбции 94 %, степень десорбции 86 %. Во втором цикле проскок ионов серебра наблюдался при пропускании первых и последних 30 $см^3$, степень сорбции 86 %, степень десорбции 76 %. В третьем цикле ионы серебра присутствовали во всех пробах фильтрата степень сорбции 36 %, степень десорбции 68 %. На основании данных результатов можно сделать вывод о том, что количественного извлечения ионов серебра добиться не удалось, однако ТП проявляет высокоселективные свойства по отношению к ионам серебра, степень сорбции и десорбции на протяжении двух последовательных циклов свыше 75 %, при этом сорбция других ионов металлов не наблюдалось.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Программы развития Уральского федерального университета имени первого Президента России Б.Н. Ельцина в соответствии с программой стратегического академического лидерства "Приоритет-2030"

1. Sim W., Barnard R. T., Blaskovich M.A.T., Ziora Z. M. Antimicrobial Silver in Medicinal and Consumer Applications: A Patent Review of the Past Decade (2007–2017) // Antibiotics. 2018. V. 7(4). 93.
2. Yu S., Yin Y., Liu J.. Silver nanoparticles in the environment // Environmental Science: Processes & Impacts. 2013. № 15. P. 78-92.
3. Padhye L. P., Jasemizad T., Bolan S., Tsyusko O. V., Unrine J. M., Biswal B. K., Balasubramanian R., Zhang Y., Zhang T., Zhao J., Li Y., Rinklebe J., Wang H., Siddique K. H. M., Bolan N.. Silver contamination and its toxicity and risk management in terrestrial and aquatic ecosystems // Science of The Total Environment. 2023. V. 871, № 1. 161926
4. Мельник Е.А., Крылатова Е.Е., Холмогорова А.С., Неудачина Л.К., А.В. Пестов. Исследование селективных свойств тиокарбамоилированного полиэтилена // сборник тезисов Всероссийской конференции «Химия XXI век», г. Ижевск, 2022. С. 114–116.

ИССЛЕДОВАНИЕ ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ РЕЖИМОВ РАБОТЫ ВЫСОКОСКОРОСТНОЙ ОТСТОЙНОЙ ЦЕНТРИФУГИ

Власова Е.А.[1], Морданов С.В.[1], Хомяков А.П.[1], Шкурин П.А.[2], Белодед М.Н.[2], Родионов С.А.[2]
[1)] ФГАОУ ВО "Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина", Екатеринбург, Россия
[2)] АО "СвердНИИхиммаш", Екатеринбург, Россия
E-mail: s.v.mordanov@urfu.ru

RESEARCH OF THE HYDRODYNAMIC OPERATION MODES OF A HIGH-SPEED SEDIMENTATION CENTRIFUGE

Vlasova E.A.[1], Mordanov S.V.[1], Khomyakov A.P.[1], Shkurin P.A.[2], Beloded M.N.[2], Rodionov S.A.[2]
[1)] Ural federal univeristy, Ekaterinburg, Russia
[2)] JSC "SverdNIIKhimmash", Ekaterinburg, Russia

Two hydrodynamic regimes of high-speed sedimentation centrifuge were found. Laminar one is characterized by sedimentation of a solid phase and a liquid phase infinite mixing path. Turbulent is characterized by axial and radial pulsations of a liquid phase and decreasing of sedimentation efficiency.

Экспериментально установлено [1], что в процессе работы высокоскоростной отстойной центрифуги с вертикальным ротором возможно качественное изменение гидродинамического режима с условно ламинарного, характеризующихся осаждением частиц твердой фазы и длиной смешения для жидкой фазы, превышающей осевую протяженность центрифуги, на условный турбулентный, характеризующийся масштабными осевыми и радиальными пульсациями жидкой фазы, сопровождающимися существенным снижением эффективности осаждения (см. рисунок).

Методами вычислительной гидродинамики подтверждено, что причины возникновение радиальных и осевых пульсаций жидкой фазы в роторе высокоскоростной центрифуги не носят случайны характер и возникают в достаточно широком диапазоне скоростей вращения ротора центрифуги [1]. В выполненных ранее исследованиях [2] выдвинуто предположение, что причиной возникновения условного турбулентного режима течения в роторе высокоскоростной центрифуги являются резонансные явления, возникающие при совпадении и близких значениях частот турбулентных пульсаций жидкой фазы из расчета по радиальной скорости в роторе центрифуги (условных собственных частот колебания потока), и угловой частоты вращения ротора (вынужденных частот колебания потока).

Частотный анализ условных собственных и вынужденных частот колебаний потока в роторе высокоскоростной центрифуги показывает, что диапазон

рассмотренных в экспериментальных исследованиях [1] частот вращения ротора на три четверти перекрывает диапазон частот турбулентных пульсаций потока жидкой фазы в роторе из расчета по радиальной скорости, что косвенно подтверждается также снижением масштаба радиальных пульсаций с увеличением частоты вращения ротора центрифуги (с переходом в условный закритический режим).

По результатам работы сформулированы рекомендации по исключению условий смены условного ламинарного режима течения в роторе центрифуги на условный турбулентный.

Светлой памяти С.Н. Сыромятникова и А.И. Снегина

1. Исследование гидродинамики движения жидкости в роторе высокоскоростной центрифуги типа ОВГ / А.П. Хомяков, С.В. Морданов, В.А. Никулин, С.Н. Сыромятников, Т.В. Хомякова, А.И. Снегин // Труды Свердловского научно-исследовательского института химического машиностроения. – Екатеринбург: СвердНИИхиммаш, 2012. – С. 267-280.
2. Исследование радиальной неустойчивости потоков в роторе высокоскоростной центрифуги / С.В. Морданов , А.П. Хомяков, В.А. Никулин, П.А. Шкурин, А.И. Снегин, М.Н. Белодед // Сборник тезисов VI Международной конференции «Современные синтетические методологии для создания лекарственных препаратов и функциональных материалов» (MOSM 2022), Екатеринбург, 7–11 ноября 2022 года. – Екатеринбург: УрФУ, 2022. – VIII-16. – 1 с.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ОБЛУЧЕНИЯ НЕОРГАНИЧЕСКИХ СОРБЕНТОВ НА ИХ СОРБЦИОННЫЕ СВОЙСТВА ПО ОТНОШЕНИЮ К ЦЕЗИЮ-137

Мухарова Т.Э.[1], Семенищев В.С.[1], Титова С.М.[1], Петренко А.А.[1], Сарычев М.Н.[1]
[1)] Уральский государственный университет
E-mail: tanymyharova@gmail.com

THE EFFECT OF IRRADIATION OF INORGANIC SORBENTS ON THEIR SORPTION PROPERTIES FOR CESIUM-137

Mukharova T.E.[1], Semenishchev V.S.[1], Titova S.M.[1], Petrenko A.A.[1], Sarychev M.N.[1]
[1)] Ural Federal University

The work describes ehe effect of irradiation of inorganic sorbents on their sorption properties for cesium-137. Irradiation of the series of sorbents was performed by 10 MeV electrons using a linear accelerator. No negative effect of irradiation was observed for natural aluminosilicates.

Переработка жидких радиоактивных отходов – одна из ключевых проблем, влияющих на развитие атомной энергетики в мире. Для переработки жидких радиоактивных отходов, как правило, используются сорбционные технологии. При этом в случае переработки средне- и высокоактивных отходов одним из наиболее существенных параметров применяемых сорбентов является их радиационная стойкость. В работе было изучено влияние поглощенной дозы облучения на сорбционные характеристики неорганических сорбентов по отношению к цезию. В качестве сорбентов были взяты природные алюмосиликаты глауконит и клиноптилолит, гексацианоферраты железа (III) и никеля (II), а также глауконит и клиноптилолит, поверхностно-модифицированные гексацианоферратом никеля. Сорбенты облучали на линейном ускорителе электронов с энергией до 10 МэВ дозами 10 и 100 МГр. На облученных и необлученных образцах сорбентов определяли степень сорбции (50 мл раствора, 20 мг сорбента, начальная концентрация цезия – 25 мг/л) и коэффициенты распределения цезия. Концентрации цезия определяли на атомно-абсорбционном спектрометре Optima. Результаты представлены на рис. 1.

Сорбент	Необлученный		Облученный 10 МГр		Облученный 100 МГр	
	S	lgK_d	S	lgK_d	S	lgK_d
Природный глауконит	0,18	2,74	0,17	2,71	0,19	2,76
Модифицированный глауконит	0,25	2,92	0,27	2,89	0,24	2,90
Природный клиноптилолит	0,70	3,75	0,76	3,90	0,81	4,03
Модифицированный клиноптилолит	0,71	3,78	0,69	3,74	0,60	3,58
Гексацианоферрат никеля (II)	0,98	5,06	0,87	4,23	0,88	4,24
Гексацианоферрат железа (III)	0,71	3,78	0,73	3,83	0,53	3,45

Рис. 1. Сорбционные характеристики облученных и необлученных неорганических сорбентов к Cs

Результаты показали, что гексацианоферраты и модифицированные алюмосиликаты заметно деградировали и хуже сорбировали цезий при дозе облучения 100 МГр. В случае природных алюмосиликатов при облучении коэффициенты распределения цезия даже возрастали, что можно объяснить увеличением их пористости при облучении. Аналогичные результаты были получены в экспериментах с радиоактивным отметчиком Cs-137. В целом, изученные сорбенты обладают достаточной радиационной стойкостью для переработки высокоактивных РАО.

Работа поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (в рамках базовой части госзадания, проект № FEUZ-2023-0013.

ЭКОГЕОХИМИЯ ТЯЖЕЛЫХ МЕТАЛЛОВ И МЕТАЛЛОИДОВ В ВОДОРАСТВОРИМОЙ ФРАКЦИИ ПОЧВ ОРЕНБУРГСКОЙ ОБЛАСТИ

Мусихина К.В.[1], Окунева Т.Г.[2], Киселева Д.В.[1, 2], Шагалов Е.С.[3]
[1)] Уральский Федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина
[2)] Институт геологии и геохимии им. академика А.Н. Заварицкого УрО РАН
[3)] Уральский государственный горный университет
E-mail: kmusixina@mail.ru

ENVIRONMENTAL GEOCHEMISTRY OF HEAVY METALS AND METALLOIDS IN THE WATER-SOLUBLE SOIL FRACTION (ORENBURG REGION)

Musihina K.V.[1], Okuneva T.G.[2], Kiseleva D.V.[1, 2], Shagalov E.S[3]
[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin
[2)] The Zavaritsky Institute of Geology and Geochemistry, UB RAS
[3)] Ural State Mining University

The study is devoted to the investigation of distribution of heavy metals and metalloids (HMM) in the water-soluble soil fraction of soil samples collected over the territory of the Orenburg Region. HMM are analyzed by ICP-MS, and their environmental-geochemical indices are calculated and discussed

Почва – специфический компонент биосферы, полифазная, многокомпонентная, полидисперсная и полифункциональная открытая система, обладающая в силу совокупности природных свойств значительной буферностью, в том числе по отношению к химическому загрязнению тяжелыми металлами и металлоидами (ТММ). Наличие разных форм соединений ТММ, отличающихся как по подвижности, так и по механизмам закрепления в почве, определяет степень их экологической опасности и требует детального изучения. Последовательное фракционирование соединений ТММ в почвах, предполагающее последовательную обработку одной навески почвы специально подобранными экстрагирующими растворами, позволяет получить весьма полную картину распределения ТММ по формам соединений. Водорастворимая и обменная фракции представляют собой наиболее подвижные и биологически доступные формы соединений ТММ в почвах [1, 2].

Цель работы – на основе анализа фракционирования тяжелых металлов и металлоидов в водорастворимой фракции почв выполнить комплексный эколого-геохимический анализ состояния Оренбургской области.

Материалы и методы. Исследована коллекция почв (порядка 300 шт), отобранных на территории Оренбургской области за полевые сезоны 2020 и 2022 гг. Поверхностный почвенный слой, в зависимости от мощности, отбирался с глубины до 10 см, где расположена основная масса корней растений. Образцы почв просушены на воздухе и растерты в яшмовой ступке до однородности.

Экстракция ТММ в водную фазу проведена следующим образом: 1 грамм почвы помещают в полипропиленовую пробирку объемом 15 мл, заливают 10 мл ультрачистой воды и встряхивают в лабораторном шейкере в течение 3 часов. Полученную суспензию центрифугируют при 3000 об/мин в течение 10 минут. Для максимально возможного растворения компонентов почвы и насыщения раствора пробу помещают на 1 час в ультразвуковую ванну, после чего снова центрифугируют при 3000 об/мин в течение 10 минут, чтобы осадок сконцентрировался на дне пробирки, и отфильтровывают раствор через ацетатно-целлюлозный фильтр-насадку ABLUO GVS с крупностью пор 0,2 мкм. В полученную водную вытяжку добавляют элемент внутреннего стандарта (In) из расчета, чтобы его концентрация составила 10 мкг/л.

Содержания ТММ (As, Cd, Pb, Cs, Bi, Zn, Cu, Mn, Sn, V, Ni, Sb, Co, Be, Cr, Mo, Ba, Sr) в полученных водных вытяжках почв определены методом ИСП-МС (NexION 300S). Пробоподготовка и измерения проводились в блоке чистых помещений Института геологии и геохимии УрО РАН. Статистическая обработка полученных данных проводилась в программе Statistica 10.

Результаты. Для выявления техногенных геохимических аномалий в поверхностных горизонтах почв рассчитывалис кларк концентраций (КК) и рассеяния (КР). Суммарное загрязнение почв ТММ характеризовалось величиной суммарного показателя загрязнения Zc. Степень экологической опасности загрязнения почв ТММ определялась в зависимости от величины Zc. При оценке загрязнения почв ТММ рассчитывался коэффициент опасности Ko.

Работа выполнена в ЦКП УрО РАН «Геоаналитик» в рамках темы № 123011800012-9 государственного задания ИГГ УрО РАН.

1. Д.В. Ладонин (2006) Методы определения фракционного состава соединений тяжёлых металлов в почвах / В кн. Теория и практика химического анализа почв. Под ред. Л. А. Воробьёвой. М., ГЕОС. С. 293-309.
2. R.G. McLaren, D.W. Crawford (1973) Studies on soil copper. 1. The fractionation of copper in soils. Journal of Soil Science 24(2), 172-181.

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ТВЕРДЫХ РАДИОАКТИВНЫХ ОТХОДОВ ПРИПОВЕРХНОСТНОГО ХРАНИЛИЩА КОНВЕРСИОННОГО УРАНОВОГО ПРОИЗВОДСТВА

Наливайко К.А.[1], Скрипченко С.Ю.[1], Титова С.М.[1], Семенищев В.С.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: k.a.nalivaiko@urfu.ru

PHYSICAL AND CHEMICAL CHARACTERISTICS OF SOLID RADIOACTIVE WASTES FROM A NEAR-SURFACE STORAGE FACILITY OF URANIUM CONVERSION PRODUCTION

Nalivaiko K.A.[1], Skripchenko S.Yu.1[1], Titova S.M.[1], Semenishchev V.S.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

A complex of physico-chemical studies of solid RW of uranium production was carried out to determine the exact composition. It has been established that RW mainly consist of gypsum dehydrate and calcium carbonate. The content of uranium in the RW varies in a wide range from 0.001 to 0.5 wt. %.

На территории предприятия АО «ЧМЗ» (г. Глазов) расположено приповерхностное хранилище твердых радиоактивных отходов (РАО). Оно состоит из 3 карт, отделенных друг от друга разделительными дамбами, и в него в течение 30 лет сбрасывали отходы уранового, кальциевого и циркониевого производств предприятия. Хранилище не эксплуатируется уже более 40 лет, и в настоящее время рассматривается возможность кондиционирования размещенных в нем РАО. Первым шагом на пути к решению этой задачи является определение состава и характеристик накопленных отходов, поэтому были проведены их исследования с применение различных физико-химических методов анализа.

Толщина рекультивационного слоя грунта хранилища составляет 3-4 м, и более чем на 60 масс. % он состоит из кварца. Ниже него находятся твердые РАО, состав их характеризуется высокой степенью неоднородности как по локациям, так и по глубине залегания. Отходы карт 1 и 2 представлены преимущественно гипсом (53-87 масс. %) и кальцитом (5-11 масс. %), образовавшимися при переработке стоков уранового производства. Данные шламы характеризуются повышенным содержанием Mn, Fe, Pb, K, As, P, их присутствие указывает на наличие в отходах остатков выщелачивания урановых руд. Твердые РАО карты 3 более чем на 64 масс. % состоят из кальцита и характеризуются повышенным содержанием Cu, Mg, Ni и Cl. В данных отходах обнаружен уранофан-альфа (0,85 масс. %), который входил в состав перерабатываемого на предприятии рудного материала. Карта 3 использовалась в основном для хранения кека

выщелачивания U из руд. При этом с целью снижения радиоактивного фона сюда же сбрасывали отходы кальциевого производства.

На карте 2 на глубине 3-5 м обнаружены слои отходов циркониевого и кальциевого производств АО «ЧМЗ». Первые состоят из кальцита (около 60 масс. %) и фторида кальция (более 31 масс. %) и характеризуются повышенным содержанием Zr, Mo и Nb. Вторые более чем на 90 масс. % состоят из кальцита, в них обнаружен уранофан-альфа (1,19 масс. %), и содержится значительное количество Cu, Mg, и Ni.

Уран содержится во всём объеме отходов, при этом по глубине залегания шлама он сконцентрирован неравномерно, содержание U в слоях отходов составляет от 0,01 до 0,51 масс. %. При формировании твердой фазы отходов U переходил в осадок преимущественно в результате адсорбции на поверхности кальцита и гипса. По изотопному составу U, содержащийся в твердых РАО, близок к природному. Гранулометрический состав и влажность твёрдых РАО определяются природой основного компонента шлама. Средний диаметр частиц отходов составляет от 11 до 29 мкм, влажность – от 35 до 53 %.

В большинстве случаев активность отходов обусловлена присутствием Ra-226 и его короткоживущих дочерних продуктов распада, при этом активность Ra-226 в шламе в зависимости от его локации и глубины залегания составляет от 0,05 до 70 кБк/кг. Дополнительные исследования показали наличие заметного содержания в отходах хранилища долгоживущего альфа-излучающего изотопа Th-230 из ряда распада U-238.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-29-00846, https://rscf.ru/project/22-29-00846/

ЭКСТРАКЦИЯ УРАНА ИЗ СЕРНОКИСЛЫХ РАСТВОРОВ ВЫЩЕЛАЧИВАНИЯ ОТХОДОВ КОНВЕРСИОННОГО ПРОИЗВОДСТВА

Нечкин М.А.[1], Титова С.М.[1], Наливайко К.А.[1], Скрипченко С.Ю.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: mihail00682@mail.ru

EXTRACTION OF URANIUM FROM SULFURIC ACID SOLUTIONS OF LEACHING OF CONVERSION PRODUCTION WASTES

Nechkin M.A.[1], Titova S.M.[1], Nalivaiko K.A.[1], Skripchenko S.Yu.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

This paper presents a method for extracting uranium from conversion production sludge by leaching technology followed by liquid extraction with a mixture of 7% HDEHP + 93% Shellsol D60

На заре атомной промышленности добыча урана значительно перекрывала необходимые расходы на ядерное топливо, и большую часть добытого урана складировали. Поэтому все отходы, шламы, радиоактивные хвосты производства, содержащие уран, захоранивали, либо направляли на хвостохранилища без мыслей о дальнейшей переработке. [1,2] В наше время крупные урановые месторождения исчерпывают свои запасы. По оценке, массовая доля урана в отходах хвостохранилища конверсионного производства составляет 0,15%, что сопоставимо с содержанием металла в рудах. Поэтому, извлечение урана из техногенных источников представляет интерес для экономики атомной отрасли [3].

Также есть ещё одна проблема – это экологический аспект. Радиоактивные отходы лежат на поверхности, и в случае природных катаклизмов, длительного времени складирования продукты распада, как и часть самих отходов, могут попасть в грунтовые воды, что вызовет загрязнение прилегающих территорий. Укрепление хвостохранилищ, возведение защитных дамб полностью не решит проблему в силу ограниченного срока эксплуатации таких конструкций. Единственный вариант – гидрометаллургическая переработка с уменьшением угрозы окружающей среде.

Для переработки шламов был выбран способ выщелачивания с последующей жидкостной экстракцией. В качестве выщелачивающего агента был выбран раствор серной кислоты с концентрацией 100 г/дм^3, полученные продуктивные растворы (ПР) направляли на переработку с применением экстрагента Д2ЭГФК, работающего по катионообменному механизму.

На первом этапе проводили выщелачивание урана из шлама по предложенной схеме. Навеску влажного шлама массой 500 г обрабатывали серной кислотой с

концентрацией 100 г/дм^3 при 80 ^{o}C в течение 3 часов. Получили ПР с массовым содержанием урана 263,31 мг/дм^3 и остаточной концентрацией по кислоте 49,74 г/дм^3.

Последующую экстракцию проводили смесью инертного растворителя Shellsol D60 и различным содержанием Д2ЭГФК от 1 до 65%. Соотношение водной и органической фаз – 1:1, время контакта при постоянном перемешивании составило 15 минут. После разделения фаз рафинаты анализировали на содержание урана методом атомно-эмиссионной спектрометрии с индуктивно-связанной плазмой. На рисунке 1 приведена зависимость степени извлечения урана из продуктивного раствора от содержания Д2ЭГФК в экстрагенте.

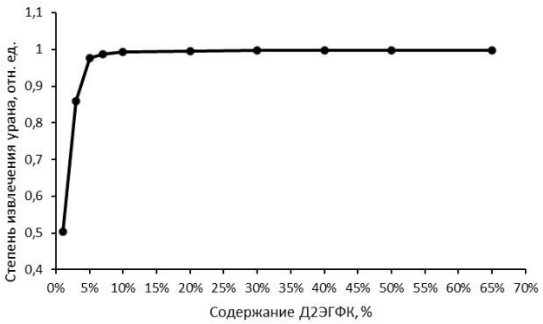


Рис. 1. Зависимость степени извлечения урана от содержания Д2ЭГФК в экстрагенте

Согласно результатам эксперимента, наиболее эффективно применение экстрагента с содержанием Д2ЭГФК 7%, что обеспечивает степень извлечения урана из продуктивного раствора 98,78%. Дальнейшее повышение концентрации Д2ЭГФК нецелесообразно, поскольку не приводит к значительному увеличению степени экстракции урана.

По результатам работы можно отметить, что технология сернокислого выщелачивания с последующей жидкостной экстракцией Д2ЭГФК является эффективным способом извлечения урана из шламов конверсионного производства.

1. Громов Б. В. Введение в химическую технологию урана. Учебник для вузов. – М.: Атомиздат, 1978, 336 с.
2. Тураев Н. С., Жерин И. И. Химия и технология урана: Учебное пособие для вузов. – Москва: ЦНИИАТОМИНФОРМ, 2005. – 407 с.
3. Вольдман Г. М., Зеликман А. Н. Теория гидрометаллургических процессов: Учеб. Пособие для вузов – 4-е изд., перераб. И доп. – М.: Интермет Инфиниринг, 2003.- 464с.: ил.

ЭЛЕКТРОРАФИНИРОВАНИЕ МОДЕЛЬНОГО ЯДЕРНОГО ТОПЛИВА В ЭЛЕКТРОЛИТАХ, СОДЕРЖАЩИХ ХЛОРИДЫ РЗЭ

Никитин Д.И.[1], Половов И.Б.[1], Ребрин О.И.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина
E-mail: house.freshone@yandex.ru

ELECTROFINING OF MODEL NUCLEAR FUEL IN ELECTROLYTES CONTAINING REE CHLORIDES

Nikitin D.I.[1], Polovov I.B.[1], Rebrin O.I.[1]
[1)] Ural Federal University named after the First President of Russia B.N. Yeltsin

During electrolytic separation of uranium from an alloy of a model nuclear fuel based on metallic uranium with the addition of imitators of fission products of BM and REE in electrolytes containing REE chlorides, cathode precipitates of high purity were obtained.

Электролитическое рафинирование металлизированного отработавшего ядерного топлива (ОЯТ) в расплавленных солевых электролитах является одним из основных этапов пирохимической переработки ОЯТ. Главной задачей данной операции является отделение урана от продуктов деления (благородных металлов и редкоземельных элементов). Кроме того, необходимо учитывать, что во время технологической работы данной операции происходит накопление хлоридов РЗЭ в электролите, переходящих из анодной массы. Для достижения данной цели необходимо провести опыты по электролитическому выделению урана из модельного сплава, имитирующего отработавшее ядерное топливо. В качестве электролита используются расплавленные соли на основе эвтектической смеси 3LiCl–2KCl, которые имеют низкую температуру плавления и могут быть использованы в качестве основной соли для пирохимической переработки ОЯТ. К используемой соли произвели добавки хлоридов РЗЭ, которые имитируют накопление РЗЭ при многократном повторяющемся процессе электролитической переработки ОЯТ. Расчет добавок хлоридов РЗЭ в электролите осуществляли в соотношении Nd:Ce:La:Pr:Sm:Y = 15:10:5:5:5:1.

Эксперименты проводили при температуре 550 °C, содержанием трихлорида урана в электролите 10.1 мас. %, а также удельном количестве пропущенного электричества 1.0 А·ч/см^2.

Фотографии полученных катодных осадков показаны на рисунке 1.

Рис. 1. Катодные осадки, полученные в ходе электролитической переработки МЯТ при варьировании начальной катодной плотности тока

Для оценки эффективности электролитического выделения урана, были произведены химические анализы катодных осадков, электролита, а также анодных шламов.

Анализ электролита показал, что из анода в электролит перешло: 3.4 % благородных металлов, 21.3 % редкоземельных металлов. Именно поэтому нами были обнаружены данные компоненты и в катодном осадке, суммарное содержание БМ в катодном осадке составило $6.6 \cdot 10^{-4}$ мас. %, суммарное содержание РЗМ составило $1.7 \cdot 10^{-3}$ мас. %.

При электролитическом выделении урана из сплава модельного ядерного топлива на основе металлического урана с добавлением имитаторов продуктов деления БМ и РЗЭ в электролитах, содержащих хлориды РЗЭ, получены катодные осадки высокой чистоты. БМ в основной массе накапливаются в анодном шламе, тем не менее происходит частичный переход серебра и палладия в электролит, что влечет за собой появление этих элементов в катодном осадке. Несмотря на присутствие в электролите ионов палладия и серебра, а также добавление в электролит хлоридов РЗЭ, накопление которых происходит при многократном проведении процесса рафинирования, данный метод позволяет достичь высоких коэффициентов очистки (по БМ свыше 10^3, по РЗЭ – 10^2).

1. Sangster, J. Phase diagrams and thermodynamic properties of the 70 binary alkali halide systems having common ions / J. Sangster, A.D. Pelton // Journal of Physical and Chemical Reference Data. – 1987. – Vol. 16. – No. 3. – P. 509-561. 109.

2. Никитин, Д.И. Анодные процессы урановых сплавов, содержащих палладий и неодим в расплавах 3LiCl–2KCl-UCl3 / Д.И. Никитин, И.Б. Половов, О.И. Ребрин, А.В. Щетинский, А.С. Дедюхин // Расплавы. – 2023. – №2 – С. 1-11.
3. Strepetov, K.E. Electrochemical behavior of uranium–palladium alloys in molten eutectic mixture of lithium, potassium and cesium chlorides / K.E. Strepetov, A.A. Osipenko, V.A. Volkovich // AIP Conference Proceedings. – 2022. – Vol. 2466. – P. 050033.
4. Кесикопулос. В.А. Изготовление интерметаллида UPd3 и исследование его термодинамических характеристик / В.А. Кесикопулос, А.М. Потапов, А.Е. Дедюхин, Ю.П. Зайков // Сборник трудов семинара «Электрохимия в распределенной и атомной энергетике». Нальчик: Ажур. – 2022. – С. 224-226.

PREPARATION OF FUCOIDAN COATED LIPOSOSMES FOR TUBERCOLOSIS TREATMENT

Obiedallah M.M.[1, 2], Mironov M.A.[1]
[1)] Department of Technology for Organic Synthesis, Institute of Chemical Technology, Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia.
[2)] Department of Pharmaceutics, Faculty of Pharmacy, Assiut University, Assiut 71526, Egypt.
E-mail: m.mh.obid@gmail.com

The current study describes the utilization of fucoidan, a negatively sulfated polysaccharide, as a coating material for the development of liposomes loaded with an antimycobacterial compound.

Salviano et al. [1], investigated the capability of fucoidan coated liposomes to deliver the antibacterial medication usnic acid to macrophages infected with Mycobacterium tuberculosis. The research showed that usnic acid, both in its free form and enclosed in fucoidan coated liposomes, was efficient against infected macrophages. In our investigation, positively charged liposomes were firstly produced using the thin film hydration method and their particle size, PDI, and zeta potential were measured. The selected liposomal formulation was next coated with various concentrations of fresh fucoidan solution. The concentrations of fucoidan solutions used were 0.05%, 0.1%, 0.3%, 0.5% and 1 % w/v in a volume ratio 1:1 of liposomes to fucoidan solution. The concentration of 0.5 % fucoidan solution demonstrated the best stable fucoidan coated liposomes with acceptable properties. The mean particle size of the selected fucoidan coated liposomes was 336.3 nm with PDI about 0.337. Changes in zeta potential from +45.2 mv for uncoated liposomes to –39.6 mv for fucoidan coated liposomes suggested that the fucoidan was placed on the surface of the liposomes. Hence, this preliminary investigation suggests that encapsulated compound will aid in further studies related to infected macrophages and may be a potential option for tuberculosis treatment.

1. T. Lima Salviano et al., “Fucoidan-Coated Liposomes: A Target System to Deliver the Antimicrobial Drug Usnic Acid to Macrophages Infected with Mycobacterium tuberculosis,” J. Biomed. Nanotechnol., vol. 17, no. 8, pp. 1699–1710, Aug. 2021.

ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ТЕРМО-ЭДС ПАРЫ Rh-Ag НА ИЗМЕРЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ УСЛОВНОГО СТАНДАРТНОГО ПОТЕНЦИАЛА РОДИЯ

Осипенко А.А.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: vida1995@yandex.ru

STUDY OF THE EFFECT OF THE Rh-Ag THERMO-EMF PAIR ON THE MEASURED VALUES OF THE CONDITIONAL STANDARD POTENTIAL OF RHODIUM

Osipenko A.A.[1]
[1)] Ural Federal University, Ekaterinburg 620002 Russian Federation

Rh-Ag thermo-EMF pair was determined in the temperature range of 318,5–923 K. The effect of thermo-EMF on the conditional standard potential of rhodium in molten LiCl–KCl–CsCl eutectic mixture was studied.

Разности температур между внутренними и внешними концами токоподводов к электродам высокотемпературных ячеек достигают многих сотен градусов. Поэтому между токоподводами из разных материалов возникает термо-ЭДС, которая входит наряду с разностью электрохимических электродных потенциалов в измеряемую на опыте величину ЭДС ячейки [1]. Термо-ЭДС определяется разностью температур горячих и холодных контактов и зависит от природы материалов проводников [2].

Измерения условного стандартного потенциала родия в расплавленной эвтектической смеси LiCl-KCl-CsCl проводились на проволоке из родия относительно серебряного электрода сравнения, при этом создается термо-ЭДС пары Rh-Ag, которую необходимо в зависимости от знака перед модулем прибавлять / вычитать из значений потенциала, фиксируемых потенциостатом.

Для измерения термо-ЭДС в узкую ячейку 10-12 мм поместили термопару и «термопару» Rh-Ag. Эту ячейку поместили в другую ячейку и в печь, «утеплив» ватой. Фиксирование потенциала проводились с помощью метода хронопотенциометрии. Так как полученные величины термо-ЭДС отрицательные, то модуль необходимо прибавлять к значениям потенциалов, полученных на данном электроде. На рис.1 представлена температурная зависимость условного стандартного потенциала родия в LiCl-KCl-CsCl в диапазоне температур 773–923 К, в котором влияние термо-ЭДС демонстрирует наибольший сдвиг потенциала.

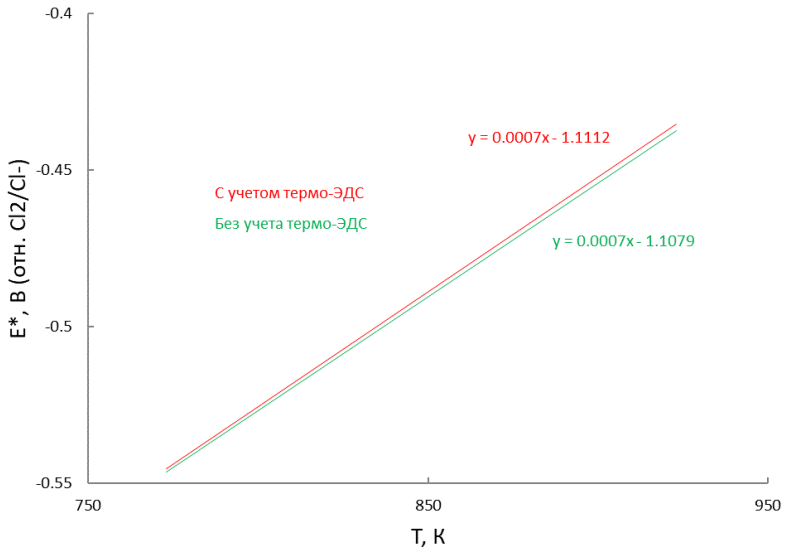


Рис. 1. Зависимость условного стандартного потенциала родия от температуры

1. Смирнов М. В. Электродные потенциалы в расплавленных хлоридах. М.: Наука (1973).
2. Иоффе А. Ф. Физика полупроводников. М. – Л.: АН СССР (1957).

ОПРЕДЕЛЕНИЕ МОЛЬНОГО СООТНОШЕНИЕ $AlCl_3$/KCl В РАСПЛАВЕ $ZrCl_4$ – KCl – $AlCl_3$

Панфилов А.В.[1], Коробков А.В.[2], Бузмаков В.В.[2], Терешин В.В.[2], Половов И.Б.[3], Ившина А.А.[3]
[1)] АО «ТВЭЛ», г. Москва, Россия
[2)] АО «Чепецкий механический завод», Удмуртская Республика, г. Глазов, Россия
[3)] ФГАОУ ВО «УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», г. Екатеринбург, Россия
E-mail: AVPanfilov@tvel.ru

DETERMINATION OF THE MOLAR RATIO $AlCl_3$/KCl IN THE MELT $ZrCl_4$ – KCl – $AlCl_3$

Panfilov A.V.[1], Korobkov A.V.[2], Buzmakov V.V.[2], Tereshin V.V.[2], Polovov I.B.[3], Ivshina A.A.[3]
[1)] SC «TVEL», Moscow, Russia
[2)] SC «Chepetsky Mechanical Plant», Glazov, Russia
[3)] Federal State Autonomous Educational Institution of Higher Education "Ural Federal University named after the First President of Russia B.N. Yeltsin", Yekaterinburg, Russia

A method for determining the molar ratio of $AlCl_3$/KCl in the melt $ZrCl_4$-KCl – $AlCl_3$ has been developed. The developed technique was tested on the working melt of the rectification plant of JSC ChMZ. Frozen alloy samples were analyzed by X-ray diffractometry.

Разделение хлоридов циркония и гафния методом экстрактивной ректификации – одно из наиболее перспективных направлений для получения этих металлов высокой чистоты. В качестве экстрагента применяется расплав $AlCl_3$ - KCl с мольным соотношением $AlCl_3$/KCl = 1,04 - 1,10 [1]. Мольное отношение $AlCl_3$/KCl имеет большое влияние на эффективность процесса [2].

Химические и спектральные методы анализа позволяют определить общее содержание Al, K и Zr, но не устанавливают соединение, в которое входит тот или иной элемент.

Разработан метод определения мольного соотношения $AlCl_3$/KCl, основанный на различии в физико-химических свойствах компонентов расплава. Метод включает:

а) отгонку $ZrCl_4$ из пробы расплава потоком аргона в течение 30 мин. при температуре 550 °C с последующим определением содержания основных элементов. В данных условиях $ZrCl_4$ полностью отгоняется, оставшийся Zr находится в форме K_2ZrCl_6 [3] и/или в кислородсодержащих формах $ZrOCl_2$, ZrO_2.

б) введение в пробу навески $AlCl_3$, при этом поступивший в солевую систему хлорид алюминия вступает в химическое взаимодействие с находящимся в

расплаве гексахлорцирконатом калия, в результате чего образуется более термодинамически устойчивое в данной системе соединение – $KAlCl_4$, в соответствии с реакцией 1:

$$K_2ZrCl_6 + 2AlCl_3 \leftrightarrow 2KAlCl_4 + ZrCl_4 \quad (1)$$

в) отгонку из пробы образовавшегося $ZrCl_4$ потоком аргона в течение 30 мин. при температуре 550 °С с последующим определением содержания основных элементов. Оставшийся Zr находится в кислородсодержащих формах: $ZrOCl_2$, ZrO_2.

Массовая концентрация K_2ZrCl_6 определяется как разность концентрации циркония после выполнения п. а) и п. в).

Наличие в системе K_2ZrCl_6 указывает на недостаток хлорида алюминия по отношению к хлориду калия, этот недостаток может быть рассчитан по уравнению реакции 1.

Разработанная методика опробована на рабочем расплаве установки ректификации АО ЧМЗ. Результаты представлены в таблице 1.

Проба	Zr, %	Al/K моль/моль	Фазовый состав
Исходный расплав	1,8	1,006	$KAlCl_4$ - 95,2 % K_2ZrCl_6 – 4,8 %
После п. а) методики (отгонка 30 мин., 550 °С)	0,99	1,006	$KAlCl_4$ – 95,1 % K_2ZrCl_6 – 4,9 %
После п. в) методики (добавления $AlCl_3$ и отгонки 30 мин., 550 °С)	0,39	1,056	$KAlC_4$ – 100 %
После добавления второй навески $AlCl_3$ и отгонки аргоном 30 мин., 550 °С	0,34	1,063	$KAlCl_4$ — 100 %

Таблица 1. Результаты определения соотношения AlCl3/KCl по предложенной методике и фазовый состав замороженных плавов

Расчетное мольное соотношение $AlCl_3$/KCl, полученное по разработанной методике, составляет 0,986, что существенно ниже значения 1,006, которое получено на основании определения «общего» алюминия и калия в расплаве по результатам химического элементного анализа.

Введение хлорида алюминия проводилось в два этапа, из расчета увеличения мольного соотношения $AlCl_3$/KCl на 0,05. Показано, что повторное введение хлорида алюминия практически не привело к снижению концентрации циркония.

Замороженные пробы плавов были проанализированы методом рентгеновской дифрактометрии. Полученные результаты подтвердили наличие фазы K_2ZrCl_6 в исходном расплаве и расплаве после выполнения п. а) и отсутствие данной фазы после выполнения п. в) разработанной методики.

Разработанная методика внедрена в ЦНИЛ АО ЧМЗ и используется для расчета корректировки расплава установки ректификации по хлориду алюминия.

1. US Pat. 4021531. Process for the separation of zirconium and hafnium tetrachlorides from mixtures thereof. Paul Besson, Jean Guerin, Pierre Brun, Michel Bakes. - Publ. 03.05.1977.
2. Molten Salts Chemistry. From Lab to Applications. P. 497-520. Molten Salts for Nuclear Applications/ Sylvie Delpech IPNO, Universite´ Paris Sud, Paris, France
3. Морозов, И.С. Применение хлора в металлургии редких и цветных металлов / И.С. Морозов – М: Наука, 1966. – 253 с

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕМЕНТНОГО СОСТАВА АЛЮМОСИЛИКАТНЫХ МИКРОСФЕР ЗОЛЬНЫХ УНОСОВ ТЕПЛОЭЛЕКТРОСТАНЦИЙ МЕТОДОМ РФА

Печищев И.В.[1], Абрамов А.В.[1], Устьянцев Ю.Г.[1], Шихалеева М.А.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: pechishchevilya@gmail.com

DETERMINATION OF ELEMENTAL COMPOSITION OF ALUMOSILICATE MICROSPHERES OF FLY ASH FROM THERMOELECTRIC PLANTS BY WD-XRF

Pechishchev I.V.[1], Abramov A.V.[1], Ustyantsev Yu.G.[1], Shikhaleeva M.A.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

An X-ray fluorescence method was used to determine the composition of aluminosilicate microspheres of fly ash from thermoelectric plants. Sample preparation was carried out by sample fusion with lithium-borate flux. The metrological characteristics of the analysis technique were also evaluated.

Одним из побочных продуктов работы тепловых электростанций являются алюмосиликатные микросферы (АСМ), представляющие собой лёгкую фракцию золы уноса, состоящую из полых тонкостенных частиц сферической формы. Данная фракция образуется в результате расплавления минеральных компонентов углей при их сжигании в установках ТЭС. Благодаря малой плотности, низким тепло- и электропроводности, высокой термической стойкости и малой себестоимости данный материал нашёл широкое применение в качестве наполнителя для строительных материалов, керамики, различных пластмасс, производства композиционных материалов и т.д. [1, 2]

Однако микросферы в образующейся золе имеют широкий спектр по содержанию компонентов, размерам, плотности, толщине стенок и другим параметрам, определяющим свойства материала. Поэтому важным является проведение полного цикла выделения и сепарации микросфер для получения материала с определёнными качествами в соответствии с областями применения [2]. Одним из методов, позволяющих проводить оперативный контроль правильности выполнения всех этапов производства и качества итогового материала, является рентгенофлуоресцентная спектрометрия.

Целью данной работы являлась разработка методики определения содержания Al, Ca, Fe, K, Mg, Na, P, Si, и Ti в образцах АСМ методом волнодисперсионной рентгенофлуоресцентной спектрометрии. Для решения данной задачи был синтезирован комплект из пяти градуировочных образцов методом высокотемпературного растворения (ВТР) проб в литий-боратном

флюсе, подобраны условия для возбуждения и регистрации аналитического сигнала с учётом фона и построены градуировочные зависимости для каждого определяемого элемента. Также была проведена оценка метрологических характеристик разработанной методики согласно РМГ 61–2010, для чего был синтезирован комплект из 10 образцов одинакового состава методом ВТР.

В дополнение был проведён сравнительный анализ с методикой, пробоподготовка в которой проводилась путём прессования анализируемых проб на подложке из борной кислоты.

1. Тас-оол Л.Х., Янчат Н.Н., Чоксум Ж.Э. Вестник Тувинского государственного университета. № 3(14), с. 33-37 (2012).
2. Полые микросферы в золах уноса электростанций: Сборник научных статей / Под ред. В.С. Дрожжина. – Саров: ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 125 с. (2009).

АНАЛИЗ ГАЗОВОГО И СОЛЕВОГО СОСТАВА ФЛЮИДНЫХ ВКЛЮЧЕНИЙ ФЕНАКИТА УРАЛЬСКИХ ИЗУМРУДНЫХ КОПИЙ ПО ДАННЫМ СПЕКТРОСКОПИИ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА

Печурин М.С.[1, 2], Панкрушина Е.А.[2], Жилин А.С.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н, Ельцина, Екатеринбург, Россия
[2)] Институт геологии и геохимии им. академика А.Н. Заварицкого УрО РАН, Екатеринбург, Россия
E-mail: Mikhail.Pechurin@urfu.me

ANALYSIS OF THE GAS AND SALT COMPOSITION OF PHENAKITE FLUID INCLUSIONS (MIDDLE URAL) ACCORDING TO RAMAN SPECTROSCOPY DATA

Pechurin M.S.[1, 2], Pankrushina E.A.[2], Zhilin A.S.[1]
[1)] Ural Federal University named after the First President of Russia B.N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia
[2)] Institute of Geology and Geochemistry named after Academician A.N. Zavaritsky Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia

Methodical techniques for identifying salt hydrates in fluid inclusions using Raman spectroscopy were carried out; for the first time, the salt composition (NaCl·2H2O) in the natural phenakite (Ural) was identified. The obtained data will be used as a basis for petrogenetic constructions.

Первые находки минерала фенакита (Be_2SiO_4) обнаружены на Уральских Изумрудных копях. В настоящее время выполнено большое количество работ по исследованию флюидных включений в таких образцах [1], но в большинстве своем в них отсутствует информация по солевому и газовому составу флюидных включений. Из-за чего сделать вывод о составе флюида, участвующего в формировании минерала, о температуре его кристаллизации и др. не представляется возможным. Однако из-за небольшого размера (до 100 мкм) флюидных включений далеко не все аналитические методы подходят для исследования их газового и солевого состава. Единственным неразрушающим высоколокальным (~1 мкм) методом исследования, позволяющим проводить анализ вещества в его объеме является спектроскопия комбинационного рассеяния света (КРС) [2]. Таким образом, целью настоящей работы является исследование флюидных включений в природных фенакитах Урала и дальнейшее выявление условия их формирования по результатам КРС.

Измерения выполнены в ЦКП «Геоаналитик» с использованием КР спектрометра Labram HR Evolution (лазер 633, 514 нм, решетка 1800 штр/мм) оборудованного термоприставкой Linkam TSM 600. Ввиду невозможности

регистрирования молекулярных колебаний солей при нормальных условиях измерения проводили при T = –190°C [2]. Флюидные включения фенакита представляют собой вытянутые замкнутые полости с заключенным в них пузырьком газа в растворе. По результатам КРС (суммарно исследовано 10 включений) в пузырьке газа зарегистрирован метан CH_4 ~2960 $см^{-1}$ (Рис. 1), спектральный пик которого при достижении T = –190°C расщепляется (из-за появления газового гидрата CH_4). При фокусировании лазерного пучка в растворе при T = 25°C спектр не наблюдается, однако при достижении T = –190°C отчетливо видны колебания гидрогалита $NaCl{\cdot}2H_2O$ (~3407, 3424, 3438, 3540 $см^{-1}$) и льда (~3073 $см^{-1}$) [2]. (Рис. 1).

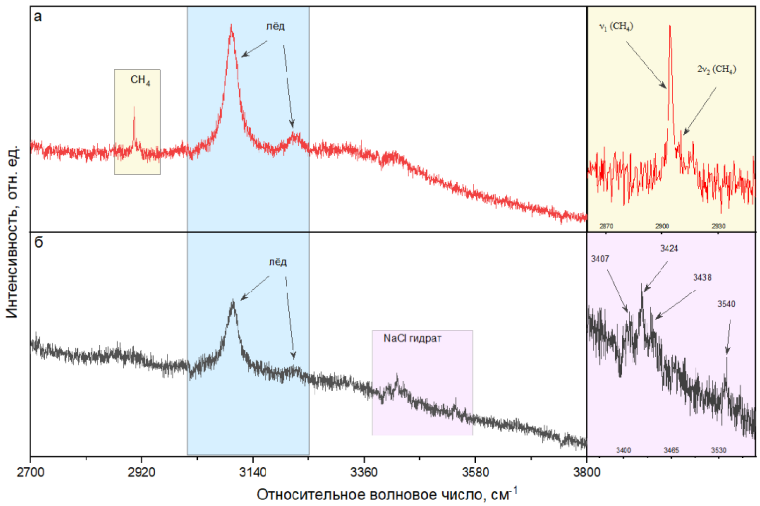


Рис. 1. Спектры КРС зарегистрированные в области пузырька газа (а) и в области солевого раствора (б) флюидного включения фенакита.

Таким образом, отработаны методические приемы идентификации гидратов солей во флюидных включениях при T = –190°C (по данным КРС) при фокусировании лазерного пучка в объеме минерала; впервые зарегистрирован и идентифицирован солевой состав ($NaCl{\cdot}2H_2O$) в природном фенаките Урала. Полученные данные будут использованы как основа для петрогенетических построений.

Работа выполнена в рамках г/б темы ИГГ УрО РАН №123011800012-9. Дооснащение и комплексное развитие ЦКП «Геоаналитик» ИГГ УрО РАН осуществляется при финансовой поддержке гранта Министерства науки и высшего образования РФ, Соглашение № 075-15-2021-680.

1. Попов М.П., Николаев А.Г. Особенности фенакитовой минерализации с Уральских изумрудных копей // Вестник Уральского отделения РМО. 2016. – № 13. – С. 105-111.
2. Baumgartner M., Bakker R. J. Raman spectra of ice and salt hydrates in synthetic fluid inclusions //Chemical Geology. – 2010. – Т. 275. – №. 1-2. – С. 58-66.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ КЕРАМИКИ В ПРОЦЕССЕ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО СТАРЕНИЯ

Пилюгина О.В.[1], Хорошавцева Н.В.[1], Денисова Э.И.[1], Карташов В.В.[1], Меркулов О.В.[2]

[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

[2)] Институт химии твердого тела УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: jkzgbk.ubyf@gmail.com

INVESTIGATION OF THE ELECTRICAL CONDUCTIVITY OF CERAMICS IN THE PROCESS OF HIGH-TEMPERATURE AGING

Pilyugina O.V.[1], Khoroshavtseva N.V.[1], Denisova E.I.[1], Kartashov V.V.[1], Merkulov O.V.[2]

[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

[2)] Institute of Solid State Chemistry of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia

Powders of various compositions based on ZrO2 doped with Y2O3 were obtained to measure the electrical conductivity of ceramic samples based on them, as well as to further study the aging of these samples.

Материалы на основе диоксида циркония находят широкое применение в качестве твердых электролитов для твердооксидных топливных элементов. Диоксид циркония ZrO_2, стабилизированный оксидами редкоземельных металлов, является наиболее часто применяемым твердым электролитом при производстве ТОТЭ. Для производства высокопрочной оксидциркониевой керамики очень большое значение имеет стабилизация нестабильных высокотемпературных фаз, которая осуществляется путем введения в кристаллическую решетку ZrO_2 некоторого количества Y_2O_3.

Предметом исследований настоящей работы были свойства керамических материалов на основе микроразмерных частиц ZrO_2–6 мол. % Y_2O_3, ZrO_2–7 мол. % Y_2O_3, ZrO_2–8 мол. % Y_2O_3. Из порошков, полученных аммиачным соосаждением с последующей грануляцией замораживанием, при давлении 245 МПа прессовали образцы-таблетки, которые обжигали в воздушной атмосфере при температуре 1650 °С по режиму: нагрев до заданной температуры - выдержка в течение 6 часов - охлаждение со скоростью нагрева.

Измеряли электропроводность образцов двухзондовым методом на переменном токе при частоте 20 кГц в интервале 873 - 1173 К. Результаты измерений представлены на рис 1.

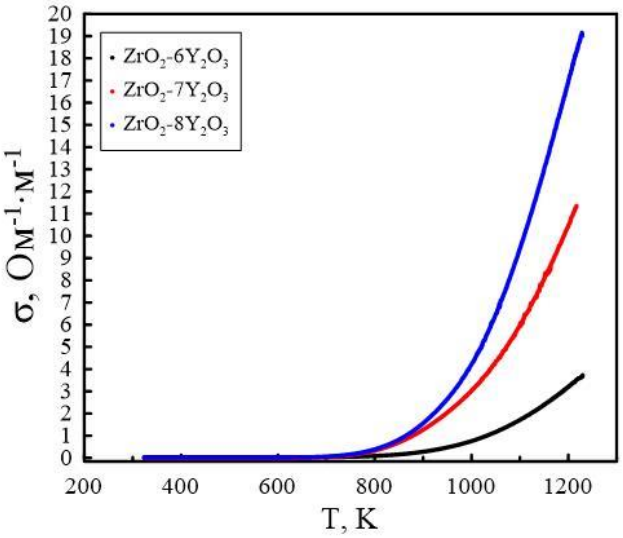


Рис. 1. Температурная зависимость удельной электропроводности

Как видно из графика (рис. 1), увеличение количества Y_2O_3 от 6 до 8 мол. % в ZrO_2 приводит к росту электропроводности керамики. Так, максимальные значения (14,82 Ом-1·м-1) были зафиксированы при 1173K для образца ZrO_2–$8Y_2O_3$.

Керамические образцы предназначены для дальнейшего измерения плотности, твердости и электропроводности.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ КЕРАМИКИ В ПРОЦЕССЕ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО СТАРЕНИЯ

Поимцева В.Ю.[1], Хорошавцева Н.В.[1], Денисова Э.И.[1], Карташов В.В.[1], Денисова О.В.[1]

[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: poimtseva.viktoria@yandex.ru

INVESTIGATION OF THE ELECTRICAL CONDUCTIVITY OF CERAMICS IN THE PROCESS OF HIGH-TEMPERATURE AGING

Poimtseva V.Y.[1], Khoroshavtseva N.V.[1], Denisova E. I.[1], Kartashov V.V.[1], Denisova O. V.[1]

[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Powders based on ZrO2 doped with various amounts of Y2O3 and Sc2O3 were obtained to study X-ray diffraction analysis and electrical conductivity of ceramic samples based on them.

Керамика на основе диоксида циркония, стабилизированного оксидами иттрия и скандия, находит широкое применение в качестве твердых электролитов для твердооксидных топливных элементов (ТОТЭ). Диоксид циркония ZrO_2, стабилизированный оксидами РЗЭ, является наиболее часто применяемым твердым электролитом при производстве ТОТЭ. Для производства высокопрочной оксидциркониевой керамики очень большое значение имеет стабилизация нестабильных высокотемпературных фаз, которая осуществляется путем введения в кристаллическую решетку ZrO_2 некоторого количества Y_2O_3 и Sc_2O_3.

Предметом исследований данной работы были свойства керамических материалов на основе микроразмерных частиц ZrO_2 – 3 мол. % Y_2O_3 – 3 мол. % Sc_2O_3, ZrO_2 – 4 мол. % Y_2O_3 – 4 мол. % Sc_2O_3, ZrO_2 – 5 мол. % Y_2O_3 – 5 мол. % Sc_2O_3. Из порошков, полученных аммиачным соосаждением с последующей грануляцией замораживанием, при давлении 245 МПа прессовали образцы-таблетки, которые обжигали в воздушной атмосфере при температуре 1650 °С по режиму: нагрев до заданной температуры - выдержка в течение 6 часов - охлаждение со скоростью нагрева.

Для характеристики керамического материала очень важна зависимость электропроводности от температуры. С повышением температуры электропроводность увеличивается, так как подвижность ионов в результате нагрева возрастает. Измеряли электропроводность образцов двухзондовым методом на переменном токе при частоте 20 кГц в интервале 873-¬1173 К. Результаты измерений представлены на рис 1.

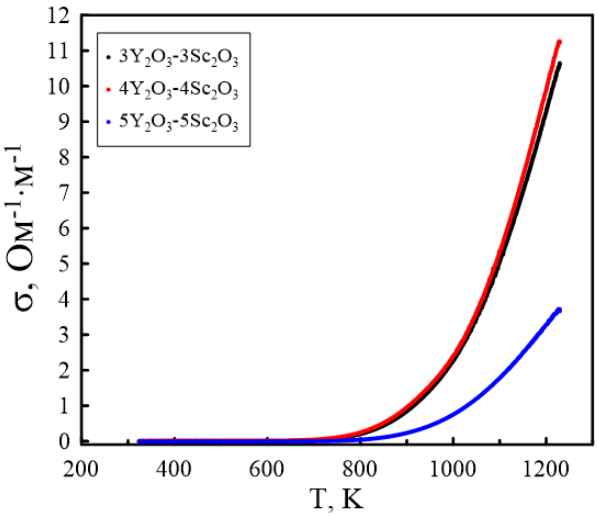


Рис. 1. Температурная зависимость удельной электропроводности

Керамические образцы предназначены для дальнейшего измерения плотности, твердости, удельной поверхности и электропроводности.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЗНАЧЕНИЯ РН ГИДРОЛИЗА НА ИЗМЕНЕНИЕ РАЗМЕРОВ ЧАСТИЦ ВО ВРЕМЯ ОСАЖДЕНИЯ И В ХОДЕ ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ

Поливода Д.О.[1], Машковцев М.А.[1, 2]
[1)] Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН
[2)] Уральский Федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина
E-mail: anotherchemist@yandex.ru

INVESTIGATION OF THE INFLUENCE OF THE PH VALUE OF HYDROLYSIS ON THE CHANGE IN PARTICLE SIZE DURING PRECIPITATION AND DURING THERMAL TREATMENT

Polivoda D.O.[1], Mashkovtsev M.A.[1, 2]
[1)] Institute of High Temperature Electrochemistry, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences
[2)] Ural Federal University

This paper present study of influence of the pH value of hydrolysis on the change in particle size during precipitation and during thermal treatment. The pH value of hydrolysis has a significant effect on particles of hydrated zirconia and on the behavior of powders during heat treatment.

Порошки из диоксида циркония используются для получения различного рода технической керамики – термобарьерных покрытий, функциональной и стоматологической керамики, биокерамики, а также ион-проводящей керамики, которая является одним из основных компонентов в твердооксидных электрохимических устройствах [1].

В качестве надежного, простого и позволяющего контролировать некоторые свойства порошков часто используется метод контролируемого двуструйного осаждения [1-3]. В данной работе особое внимание уделено поведению частиц в процессе осаждения и в ходе термической обработки.

Для получения гидроксида циркония проводили контролируемое двуструйное осаждение одновременным дозированием в реакционный объем солянокислого циркония и водного раствора аммиака при поддержании постоянного значения pH и перемешивании верхнеприводной мешалкой. В процессе осаждения отбирали пробы на 50, 70, 10, 130, 150, 170 и 200 минутах от начала осаждения для исследования изменения размеров частиц. Гидролиз проводили при значениях pH равных 5 и 8 (образцы pH5 и pH8). После осаждения осадок фильтровали, сушили при 40 °C и обжигали при 500 и 950 °C. Изменение размеров частиц в процессе осаждения и после термообработки исследовали методом лазерной дифракции с помощью анализатора частиц Analysette 22 NanoTec plus (Fritsch) с использованием ультразвука. На рисунке 1

представлены кривые количества частиц от диаметра в процессе осаждения и распределения частиц по размерам после обжига образцов.

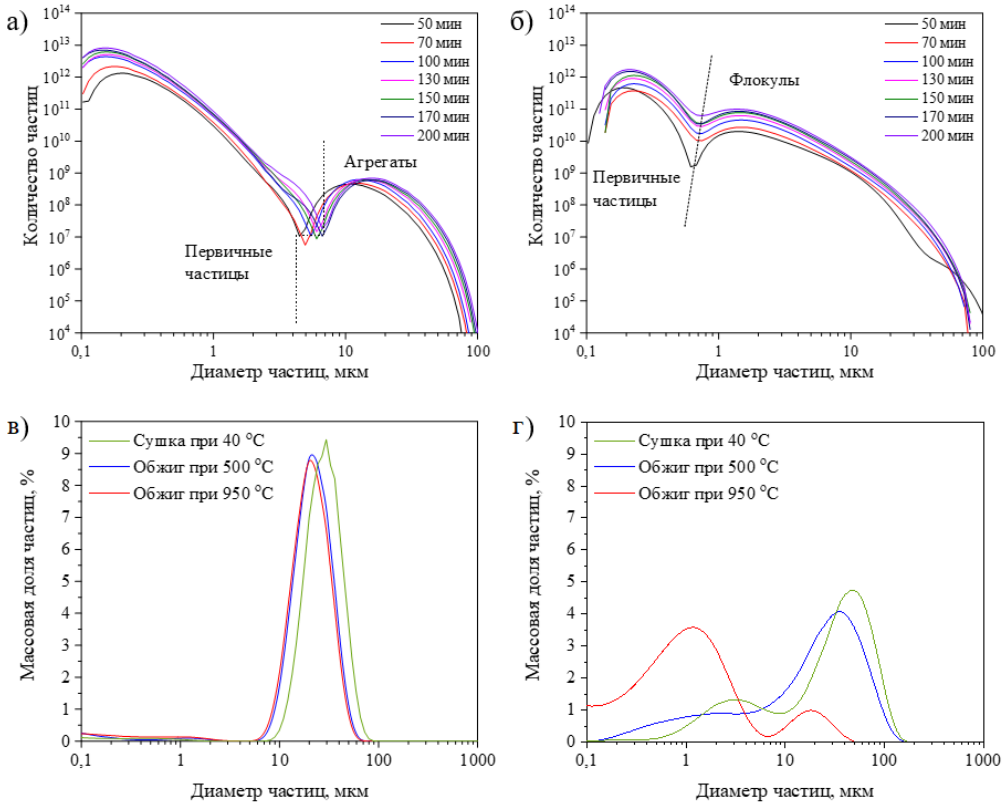


Рис. 1. Кривые количества частиц от диаметра в процессе осаждения образцов pH5 (а) и pH8 (б), а также распределения частиц по размерам после обжига образцов pH5 (в) и pH8 (г)

Показано, что для образцов характерно наличие как минимум двух популяций частиц (рисунок 1а и 1б). При этом вторая популяция (крупных частиц) образует основную массу осадка. У образца pH5 характерно смещение максимума крупных частиц в сторону увеличения диаметра, что может говорить об увеличении размеров существующей популяции за счет образующихся мелких частиц. В этом случае, вероятно, происходит агрегация и послойный рост частиц из-за чего в процессе обжига размер частиц изменяется незначительно (рисунок 1в). У образца pH8 количество крупных частиц увеличивается, а размер не изменяется. При этом новые образующие частицы не участвуют в наращивании. Это может указывать на образование флокул на начальных этапах осаждения, которые слабо связаны и в процессе обжига за счет тетрагонально-моноклинного перехода происходит сильная дезагрегация частиц (рисунок 1г). Таким образом, изменение значения pH гидролиза оказывает сильное влияние на формирование частиц гидратированного диоксида циркония, а также на поведение частиц в процессе термообработки.

1. Buinachev S. et al. A new approach for the synthesis of monodisperse zirconia powders with controlled particle size // International Journal of Hydrogen Energy. – 2021. – V. 46. – No. 32. – P. 16878-16887.
2. Aleshin D. K. et al. Evolution of layered yttrium hydroxide nitrate particles during controlled double-jet precipitation // Powder Technology. – 2020. – V. 376. – P. 12-21.
3. Mashkovtsev M. et al. Rationale for development of high surface zirconium hydroxide: Synthesis route and mechanism discussion // Powder Technology. – 2023. – P. 118299.

ВЛИЯНИЕ ЛЕГИРУЮЩЕЙ ПРИМЕСИ КОБАЛЬТА НА ФОТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТОНКИХ ПЛЕНОК PbS

Поздин А.В.[1], Маскаева Л.Н.[1, 2]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Уральский институт Государственной противопожарной службы Министерства Российской Федерации по делам гражданской обороны, чрезвычайным ситуациям и ликвидации последствий стихийных бедствий, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: andrej.pozdin@yandex.ru

THE EFFECT OF COBALT DOPANT ON THE PHOTOELECTRIC PROPERTIES OF PbS THIN FILMS

Pozdin A.V.[1], Maskaeva L.N.[1, 2]
[1)] Ural Federal University (named after the first President of Russia B.N. Yeltsin), Ekaterinburg, Russia
[2)] Ural Institute of State Fire Service of EMERCOM of Russia, Ekaterinburg, Russia

PbS thin films doped with cobalt chloride were obtained by chemical deposition from aqueous media onto glass substrates. The effect of an alloying impurity on the photoelectric properties of PbS thin films is considered.

Узкозонный PbS (E_g~0.4 эВ) широко применяется в оптоэлектронике в качестве ИК фотодетекторов, датчиков, оптических переключателей, эффективных устройств преобразования солнечного излучения, сенсоров [1-3]. Эффективным инструментом изменения полупроводниковых и фотоэлектрических свойств слоев PbS является их легирование путем введения в реакционную смесь в процессе химического осаждения добавок солей металлов. Результаты предыдущих исследований [4,5] показали, что вводимая легирующая добавка в виде соли кобальта активно влияет непосредственно на сам процесс химического осаждения пленок. Поэтому настоящая работа направлена на исследование влияние ионов Co^{2+} на фотоэлектрические свойства пленок PbS.

Тонкопленочные слои PbS получали химическим осаждением из водных растворов, содержащих ацетат свинца $Pb(CH_3COO)_2$, цитрат натрия $Na_3C_6H_5O_7$, тиомочевину $(NH_2)_2CS$, гидроксид и йодид аммония NH4OH, NH4I. Легирование пленок PbS осуществлялось ионами Co^{2+} в процессе синтеза путем введения в реактор соли $CoCl_2$ при их осаждении в течение 1.5 и 3.0 часа. Все пленки осаждали на предварительно обезжиренные подложки из стекла в жидкостном термостате «ТС-ТБ-10» при 353 К. В результате были получены пленки PbS(I,Co) сероватого цвета с хорошей адгезией к стеклянной подложке толщиной 370-470 нм.

Фотоэлектрические характеристики (темновое сопротивление R_d, вольтовую чувствительность U_s) обсуждаемых пленок измеряли на установке К.54.410 с источником излучения АЧТ 573К при частоте модуляции излучения 800 Гц и облученности $1 \cdot 10^{-4}$ Вт/см^2. Определение типа проводимости осуществляли по знаку термоэдс при создании градиента температур в области зондовых контактов.

Все пленки, полученные в присутствии хлорида кобальта (II) и иодида аммония, обладают p-типом проводимости. Динамика изменения фотоэлектрических свойств (R_d,=f[$CoCl_2$] и U_s,=f[$CoCl_2$) элементов (5×5) мм^2 на основе слоев PbS(I,Co) от содержания хлорида кобальта (II) в реакционной ванне показана на рисунке.

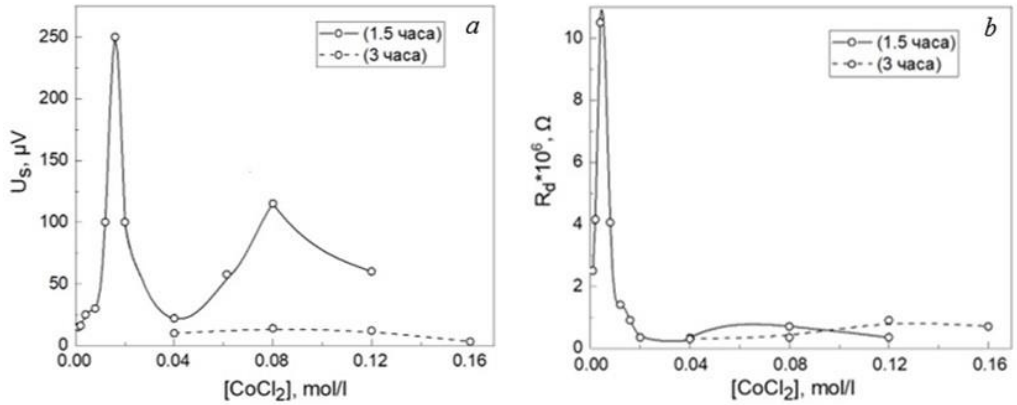


Рис. 1. Изменение вольтовой чувствительности U_S (a) и темнового сопротивления R_d (b) элементов (5×5) мм^2 на основе пленок PbS(I,Co) от концентрации $CoCl_2$ в реакционной ванне

На зависимости вольтовой чувствительности U_s как функции концентрации хлорида кобальта $CoCl_2$ в реакционной ванне пленок PbS(I,Co), химическое осаждение которых длилось 1.5 часа, наблюдаются два максимума 250 мкВ (0.016 моль/л) и 120 мкВ (0.08 моль/л). После трехчасового осаждения слои PbS(I,Co), толщина которых превышает полуторачасовые пленки примерно на 50-100 нм, обладают более слабым фотоответом.

1. P.M. Khanzode, D.I. Halge, V.N. Narwade, J.W. Dadge, K.A. Bogle. Optik, 226 (1), 165933 (2021).
2. I.V. Zarubin, V.F. Markov, L.N. Maskaeva, N.V. Zarubina, M.V. Kuznetsov. J. of Analytical Chemistry, 72 (3), 266 (2017).
3. T. Li, X. Tang, M. Chen. Coatings, 12, 609 (2022).
4. M.A. Mora-Ramírez, M. Chávez Portillo, A. Reyes Díaz, O. Portillo Moreno. Optik, 238, 166629 (2021).
5. Arzu Ekinci, Ömer Şahin, Sabit Horoz. Journal of Materials Science: Materials in Electronics, 31, 1210 (2020).

ИЗУЧЕНИЕ ТИПА ИОНА ОТВЕСТСВЕННО ЗА ПЕРЕНОС В $Na_3DyV_2O_8$

Разгуляева В.М.[1], Леонидова О.Н.[1]
[1)] Институт химии твердого тела УрО РАН, г. Екатеринбург
E-mail: lera.raz98@mail.ru

THE STUDY OF THE ION TYPE IS RESPONSIBLE FOR THE TRANSFER TO $Na_3DyV_2O_8$

Razguliaeva V.M.[1], Leonidova O.N,[1]
[1)] Institute of Solid State Chemistry of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg

As a result of studying the type of ion responsible for the transfer by the Tubandt method, unipolar transfer of sodium Na^+ ions in $Na_3DyV_2O_8$ double vanadate was established. The ionic transfer numbers were $t_i \sim 1$.

Двойной ванадат $Na_3DyV_2O_8$ относят к семейству сложных оксидов $M_3MeX_2O_8$ (M – щелочной металл, Me = Fe, Bi, Sc, Y, редкоземельный элемент, X = P, V, As) с глазеритоподобной структурой, как у природного минерала $K_3Na(SO_4)_2$. Наличие в структуре изолированных друг от друга ванадиевых тетраэдров VO_4, между которыми размещаются катионы R^3+ и Na^+, и наличие междоузельных позиций между позициями занятыми натрием, способствуют образованию непрерывных путей для миграции ионов натрия.

Ванадат $Na_3Dy(VO_4)_2$ полученный методом твердофазного синтеза имеет моноклинную структуру (пространственная группа $P2_1/n$) с параметрами элементарной ячейки для a=5.497 Å, b=9.795 Å, c=7.231 Å и β=92,84° для $Na_3Dy(VO_4)_2$.

Рентгенографическую аттестацию проводили с использованием дифрактометра Shimadzu XRD–7000 с CuK_α – излучением. Структурные параметры рассчитывали методом Ритвельда с помощью программного пакета FULLPROF. Электропроводность измеряли методом импедансной спектроскопии с использованием анализатора Solatron 1260 в интервале частот 1–10^6 Гц. Термическое расширение образцов исследовали на дилатометре LINSEIS L75V в интервале 30–1150 °C. Термический анализ проводили на воздухе с использованием термоанализатора Seteram.

Температурные зависимости электропроводности ванадата $Na_3Dy(VO_4)_2$ имеют активационный характер. Резкое повышение электропроводности около 770 °C для $Na_3Dy(VO_4)_2$ обусловлено фазовым переходом из моноклинной (пр. гр. P21/n) в тригональную (пр. гр. P–3m) структуру типа глазерита [1]. Энергия активации электропроводности до и после фазового перехода примерно одинакова и составляет 1.0 эВ для $Na_3Dy(VO_4)_2$. Фазовый переход является

причиной скачков на температурных зависимостях относительного удлинения и коэффициента термического расширения. Так как полиэдры NaOn в моноклинной структуре связаны между собой обширными междоузлиями, становится возможным перенос ионов Na^+ по междоузельному механизму. В структуре глазерита натриевые полиэдры соединены между собой прямоугольными гранями, поэтому электропроводность в результате фазового перехода и расширения решетки увеличивается примерно в два раза. Наличие низкочастотного хвоста на годографах импеданса указывает на ионную природу проводимости при использовании ионно-блокирующих электродов [2]. Методом Тубандта установлен униполярный перенос заряда в $Na_3Dy(VO_4)_2$ катионами Na^+. Ионные числа переноса составили $t_i \sim 1$.

1. Леонидова О.Н., Леонидов И.А., Патракеев М.В., Самигуллина Р.Ф. Натрий-ионный транспорт и фазовый переход в ванадате Na3ErV2O8 с глазеритоподобной структурой // Журнал неорганической химии. – 2022. – Т. 67. – № 6. – С. 693–697.
2. Electroceramics: characterization by impedance spectroscopy / J. T. S. Irvine, D. C. Sinclair et al. // Advanced Materials. – 1990. – V. 2. – P. 132–138.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕМЕНТНОГО И ИЗОТОПНОГО СОСТАВА $^{87}Sr/^{86}Sr$ ДЛЯ АУТЕНТИФИКАЦИИ И ОЦЕНКИ ГЕОГРАФИЧЕСКОГО ПРОИСХОЖДЕНИЯ РОССИЙСКИХ ВИН

Рыбакова А.Д.[1, 2], Окунева Т.Г.[1], Киселева Д.В.[1, 2], Шагалов Е.С.[3]
[1)] Институт геологии и геохимии им. академика А.Н. Заварицкого Уральского отделения РАН
[2)] Уральский Федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина
[3)] Уральский государственный горный университет
E-mail: rubakova170@gmail.com

THE ANALYSIS OF ELEMENTAL AND $^{87}Sr/^{86}Sr$ ISOTOPIC COMPOSITON FOR THE AUTHENTICATION AND DETERMINATION OF THE GEOGRAPHICAL ORIGIN OF RUSSIAN WINES

Rybakova A.D.[1, 2], Okuneva T.G.[1], Kiseleva D.V.[1, 2], Shagalov E.S.[3]
[1)] The Zavaritsky Institute of Geology and Geochemistry of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences
[2)] Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin
[3)] Ural State Mining University

The study is devoted to the development of the analytical methodology for elemental and Sr isotopic composition by Q-ICP-MS and MC-ICP-MS of wines in order to their further authentication and determination of the geographical origin by the example of Russian wines.

Установление подлинности вина и его географического происхождения являются одной из самых сложных задач аналитической химии вина [2]. Существуют единые параметры оценки качества вин, которых не всегда достаточно для определения соответствия товара его маркировке. Для установления подлинности и региональной принадлежности вин используются подходы, основанные на определении микроэлементного и изотопного состава [1]. Изотопный анализ стронция широко используется для отслеживания происхождения пищевых продуктов и выявления контрафактной продукции, в частности вин. Так как стронций переходит из почвы в растения практически без фракционирования, то по изотопной метке стронция можно соотнести продукцию (вино) с местом произрастания винограда.

Цель работы заключалась в выборе оптимального метода пробоподготовки вина, обеспечивающего простоту, экспрессность, минимизацию загрязнений и точность измерений.

Материалы и методы. Для эксперимента были взяты образцы трех разных вин: Lambrusco dolce bianco (регион Эмилия-Романья, Италия), Каберне Массандра (Крым, Россия) и Бастардо Ай-Петри (Крым, Россия). Измерения проводились в блоке чистых помещений Института геологии и геохимии УрО РАН на квадрупольном ИСП-МС NexION 300S и МК-ИСП-МС Neptune Plus.

Пробоподготовка вина проводилась четырьмя различными методами. Первый метод заключался в разбавлении аликвоты образца вина (1 мл) ультрачистой водой до 15 мл. Второй и третий метод похожи по своей сути. Во втором методе к аликвоте (6 мл) добавляют 6 мл концентрированной HNO3 (70.76%), оставляют при комнатной температуре на 12 часов и далее нагревают при 80-100 °C 5-6 часов. Затем добавляют 6 мл H_2O_2 (30%) и после прекращения бурного выделения газа выпаривают до сухого остатка. В третьем методе после добавления 6 мл концентрированной HNO_3 к 6 мл аликвоты пробы также выдерживают при комнатной температуре 12 часов, но без последующего нагревания. Остальные этапы аналогичны этапам второго метода. В четвертом методе брали аликвоту 6 мл, выпаривали до сухого остатка, добавляли 3 мл концентрированной HNO_3, затем 1 мл H_2O_2 (30%) и оставляли на 12 часов при комнатной температуре, затем выпаривали.

Вино / Метод	Lambrusco		Каберне		Бастардо	
	1	2	1	2	1	2
Метод 1	0,43	0,7	0,7	0,9	1,1	1,4
Метод 2	0,9	1	1,3	1,3	2,2	2,3
Метод 3	0,9	1,1	1,4	1,4	2,9	2,4
Метод 4	1	1,1	1,4	1,4	2,5	2,2

Рис. 1. Содержание стронция (мг/л) в образцах вина

Отметим, что для всех образцов вина проводилась предварительная дегазация в ультразвуковой ванне. Полученные сухие остатки в методах 2, 3 и 4 были растворены в 635 мкл концентрированной HNO_3, отфильтрованы. Все растворы были доведены ультрачистой водой до 15 мл. Ко всем растворам в качестве внутреннего стандарта было добавлено 150 мкл раствора индия с концентрацией 10 мг/л.

Результаты. По результатам, приведенным в таблице 1, можно сделать следующие выводы. Наибольшее содержание стронция определено в тех образцах вина, которые были подготовлены методами 3 и 4. Для дальнейшей пробоподготовки вин было решено использовать метод 4, так как он быстрее, проще и с меньшим расходом реагентов.

Работа выполнена в ЦКП УрО РАН «Геоаналитик» в рамках темы № 123011800012-9 государственного задания ИГГ УрО РАН.

1. R. Cellier, S. Berail, J. Barre et al. (2021) Analytical strategies for Sr and Pb isotopic signatures by MC-ICP-MS applied to the authentication of Champagne and other sparkling wines. Talanta 234, 122433.
2. A.A. Khalafyan, Z.A. Temerdashev, A.A. Kaunova et al. (2019) Determination of the Wine Variety and Geographical Origin of White Wines Using Neural Network Technologies. J Anal Chem 74, 617–624.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ УГЛЕРОДНЫХ ПЛАНАРНЫХ ЭЛЕКТРОДОВ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ АНТИОКСИДАНТНОЙ ЕМКОСТИ В ПОТЕНЦИОМЕТРИЧЕСКИХ ПОРТАТИВНЫХ УСТРОЙСТВАХ

Салимгареева Е.Р.[1], Саликова К.К.[1], Герасимова Е.Л.[1], Иванова А.В.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: e.r.gazizullina@urfu.ru

USE OF CARBON PLANAR ELECTRODES FOR DETERMINATION OF ANTIOXIDANT CAPACITY IN POTENTIOMETRIC PORTABLE DEVICES

Salimgareeva E.R.[1], Salikova K.K.[1], Gerasimova E.L.[1], Ivanova A.V.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Planar carbon electrodes have been proposed as a working electrode for simplicity production of portable devices. Based on the data, the characteristics of the electrodes are not inferior to platinum ones. This makes them promising for use in potentiometric portable devices.

Антиоксиданты представляют большой класс соединений разной химической природы, способные ингибировать свободнорадикальное окисление макромолекул, и, тем самым, предотвращать развитие некоторых заболеваний и патологических состояний. Поэтому определение антиоксидантной емкости (АОЕ) в различных объектах является актуальной задачей современной химии и медицины. В настоящее время описаны работы по переходу к миниатюризации устройств для определения АОЕ, однако, все они имеют некоторые недостатки и ограничения, связанные со сложностью изготовления, высокой стоимостью материалов и реагентов, низкой воспроизводимостью и точностью, что ограничивает их массовое распространение.

Для решения данных задач ранее нами были предложены некоторые прототипы портативных устройств в формате микроячейки объемом 0,2 мл и микрофлюидной системы [1], в основу которых положен потенциометрический метод с использованием системы $K_3[Fe(CN)_6]/K_4[Fe(CN)_6]$ [2].

В первых прототипах устройств в качестве электродной системы использовали платиновую проволоку (рабочий электрод) и серебряную проволоку с электрохимически осажденным хлоридом серебра (электрод сравнения). Результаты АОЕ модельных растворов антиоксидантов и их смесей, полученные с использованием данной электродной системы были достаточно воспроизводимы и согласовывались с литературными данными. Однако использование платины в качестве материала электродов существенно увеличивает стоимость устройства, что не позволяет использовать устройства как одноразовые тест-системы. Для решения данной задачи в качестве рабочего

электрода предложено использование углеродсодержащих планарных электродов. В качестве материалов выбраны следующие углеродные токопроводящие чернила Electrodag PF-407C (Loctite), Carbon paste (heavy metal detection) и Carbon paste (SunChemical).

Угловой коэффициент наклона зависимости потенциала от логарифма соотношения концентраций $K_3[Fe(CN)_6]/K_4[Fe(CN)_6]$ с использованием выбранных планарных электродов составили (48±1) мВ/декада для Electrodag, (52±1) мВ/декада для Carbon paste (heavy metal detection) и (55±1) мВ/декада для Carbon paste. Время отклика не превышало 60 с во всех случаях.

По некоторым характеристикам углеродные электроды уступают платиновому, однако, значения АОЕ модельных растворов аскорбиновой кислоты и цистеина, полученные с использованием выбранных электродных систем достаточно воспроизводимы. Относительное стандартное отклонение не превышало 3%. Правильность АОЕ оценена методом «введено-найдено» с учетом стехиометрических коэффициентов. Согласно критерию 3σ предел определения составил ($5{,}20 \cdot 10^{-}6$) М-экв/дм^3.

Таким образом, углеродные планарные электроды отличаются простотой изготовления и невысокой стоимостью, что делает перспективным их использование для определения АОЕ в потенциометрических портативных устройствах.

1. E.R. Salimgareeva, D.I. Igdisanova, D.S. Gordeeva, A.I. Matern, E.A. Yarkova, E.L. Gerasimova, A.V. Ivanova, Chim. Tech. Acta. 10(1), No. 202310104 (2023).
2. A.V. Ivanova, E.L. Gerasimova, Kh.Z. Brainina, Crit. Rev. Anal. Chem. 45, 311-322 (2015).

МЕТОД ВЫРАЩИВАНИЯ НИТЕВИДНЫХ НАНОКРИСТАЛЛОВ ДИОКСИДА КРЕМНИЯ

Небольсин В.А.[1], Самофалова А. С.[1]
[1)] Воронежский государственный технический университет, г. Воронеж, 394006, Россия
E-mail: samofalova.94@bk.ru

METHOD FOR GROWING SILICON DIOXIDE NANOWIRES

Nebol'sin V.A.[1], Samofalova A.S.[1]
[1)] Voronezh State Technical University, Voronezh, 394006, Russia

A method is proposed for growing silicon dioxide nanowires (NWs) on silicon substrates according to the vapor-liquid-crystal scheme. The use of the proposed method will allow the stable growth of oriented NWs SiO2 and coaxial Si/SiO2 structures.

Предложен метод и технология выращивания нитевидных нанокристаллов (ННК) диоксида кремния (SiO_2) на кремниевых подложках по схеме пар→жидкая капля→кристалл (ПЖК). Суть метода заключается в том, что перед помещением монокристаллической кремниевой пластины с нанесенными на ее поверхность мелкодисперсными частицами катализатора в ростовую печь, нагревом и осаждением Si из газовой фазы, содержащей $SiCl_4$, H_2 и O_2, по схеме ПЖК с одновременным его окислением катализатор выбирают из ряда металлов, имеющих количественные значения логарифма упругости диссоциации $lgp_{O2(MenOm)}$) для реакции образования оксида $nMe_{(тв)} + m/2 * O_2$ (г) - $Me_nO_{m(тв)}$,, где Me - металл, O - кислород, n и m - индексы, при 1000 K более - 36,1, причем частицы Me-катализатора выбирают с диаметрами менее 100 нм, а температуру процесса выращивания устанавливают в интервале 1000-1300 K. Металлами, которые при 1000 K обладают значениями логарифма упругости диссоциации $lgp_{O2(Men\ Om)}$ более - 36,1, являются Au, Pt, Pd, Cu, Ni, Fe и др. Выбор катализатора из ряда Me, обладающих при 1000 K значениями логарифма упругости диссоциации более - 36,1, определяется тем, что при 1000 K значение логарифма упругости диссоциации SiO_2 $lgp_{O2(MenOm)}$= -36,1 [1]. В условиях, когда $p_{O2(SiO2)} < p_{O2(MenOm)}$) идет окисление Si, а не Me-катализатора, в результате рост ННК не блокируется. Выбор частиц Me-катализатора с диаметрами менее 100 нм определяется тем, что размеры катализатора определяют диаметр ННК, а чем меньше диаметр частицы катализатора и, следовательно, меньше диаметр ННК, тем больше их химическая активность.

Использование предлагаемого метода позволяет устойчиво выращивать ориентированные ННК SiO_2 и формировать коаксиальные структуры ННК Si/SiO_2, которые обладают великолепными фотолюминесцентными и диэлектрическими свойствами, а также превосходной биосовместимостью.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-22-00449, https://rscf.ru/project/22-22-00449/

1. Nebol'sin V.A., Johansson J., Suyatin D. B., Spiridonov B. A. Thermodynamics of oxidation and reduction during the growth of metal catalyzed silicon nanowires // J.Cryst. Growth, 2019. N. 505. P. 52–58.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЗНАЧЕНИЯ РН ОСАЖДЕНИЯ НА СТЕПЕНЬ СООСАЖДЕНИЯ ГАДОЛИНИЯ С ГИДРОКСИДОМ ЦИРКОНИЯ В ХОДЕ КОНТРОЛИРУЕМОГО ОСАЖДЕНИЯ

Сазонов И.М.[1], Баженова Е.С.[1], Буйначев С.В.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: sazonovilya15@mail.ru

INVESTIGATION OF THE INFLUENCE OF THE PH VALUE ON THE DEGREE OF CO-DEPOSITION OF GADOLINIUM WITH ZIRCONIUM HYDROXIDE DURING CONTROLLED DEPOSITION

Sazonov I.M.[1], Bazhenova E.S.[1], Buynachev S.V.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The work is aimed at studying the effect of precipitation pH on the degree of co-precipitation of gadolinium in gadolinium zirconate. It is shown that the pH precipitation affects the properties of the obtained oxides.

В настоящее время повышенный интерес представляет разработка химически инертных тугоплавких материалов, способных работать при высоких температурах. Одним из таких материалов является цирконат гадолиния, который представляет собой смесь оксидов $2ZrO_2$-Gd_2O_3. Цирконат гадолиния находит широкое применение в промышленности и ядерной энергетике благодаря сочетанию таких свойств, как высокая термическая, коррозионная и радиационная стойкость, низкая температура спекания и низкая теплопроводность [1]. На сегодняшний день цирконаты гадолиния получают обратным осаждением, однако данный метод не позволяет регулировать свойства порошков [2]. Таким образом, поиск новых методов синтеза цирконатов гадолиния является актуальным.

В данной работе провели исследование влияния значения pH на степень соосаждения гадолиния с гидроксидом циркония в условиях контролируемого двухструйного осаждения (КДО). Для осаждения использовали смесь растворов нитратов цирконила и гадолиния с концентрацией каждого компонента 60 г/л в пересчете на оксиды. Осаждение проводили в течение 100 минут при значениях pH = 6,5; 6,75; 7; 7,25 и 7,5. В качестве осадителя использовали 10 %-й раствор аммиака. Перемешивание суспензии осуществляли при помощи верхнеприводной мешалки, скорость перемешивания составляла 300 об/мин. Концентрацию гадолиния в маточном растворе и степень соосаждения гадолиния определяли методом комплексонометрического титрования. Далее образцы будут обозначены как «образец pH ...».

В ходе осаждения при различных pH были получены сфероидальные агрегаты с различным средним диаметром частиц и степенью соосаждения гадолиния.

На рисунке 1 представлено изменение концентрации гадолиния в маточном растворе и степени осаждения в ходе осаждения для образцов pH = 6,5; 6,75; 7; 7,25 и 7,5.

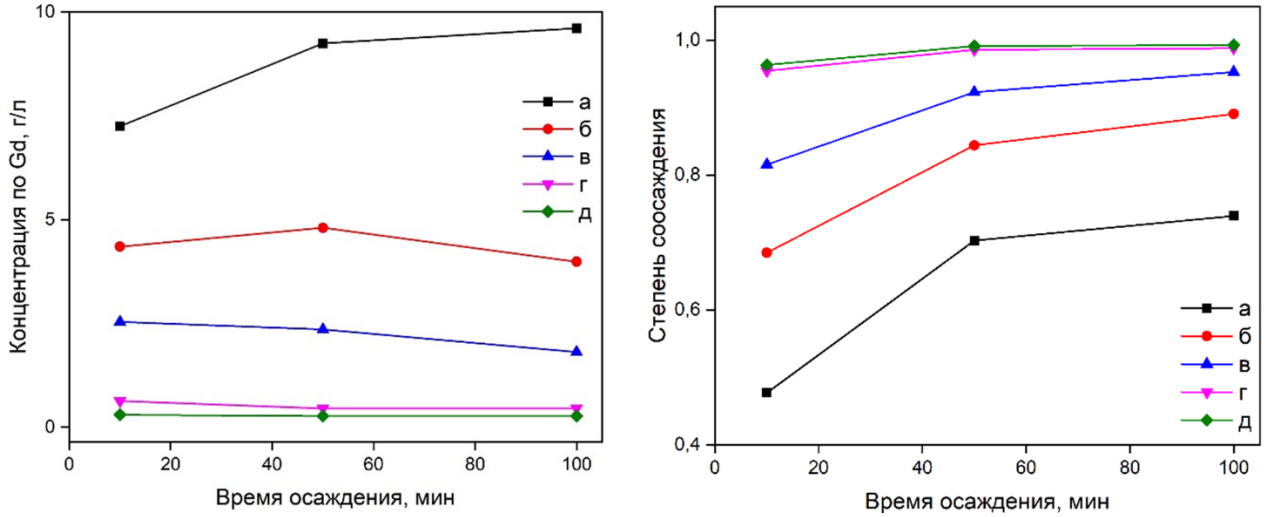


Рис. 1. Зависимость концентрации гадолиния (слева) и степени соосаждения гадолиния (справа) от времени осаждения для образцов: а) pH 6,5; б) pH 6,75; в) pH 7; г) pH 7,25; д) pH 7,5.

Показано, что увеличение значение pH осаждения значительно влияет на концентрацию гадолиния в маточном растворе и степень соосаждения гадолиния. Для образца pH 6,5 наблюдается повышение концентрации гадолиния в ходе осаждения. Для образца pH 6,75 концентрация гадолиния повышается до 50-й минуты и уменьшается до 100-й минуты. Для образца pH 7 наблюдается снижение концентрации гадолиния в ходе осаждения. Для образцов pH = 7,25 и 7,5 Наблюдается резкое снижение концентрации гадолиния до 50-ой минуты и выравнивание концентрации в обоих случаях.

Показано, что степень соосаждения гадолиния возрастает с увеличением длительности осаждения для всей серии образцов. Для образцов pH = 7,25 и 7,5 наблюдается высокая степень соосаждения, которая уже к 10-ой минуте достигает 95 и 96 % соответственно, при этом к концу осаждения степень соосаждения достигает 98 и 99 %. Финальные степени соосаждения для образцов pH = 6,5; 6,75 и 7 достигают 74, 89 и 95 % соответственно.

Таким образом, варьирование pH в ходе КДО позволяет влиять на степень осаждения гадолиния. При сравнении образцов показано, что образцы с наибольшей степенью соосаждения гадолиния получены при pH = 7,25 и 7,5.

1. С. Ю. Саенко, В. А. Шкуропатенко, Р. В. Тарасов, К. В. Лобач, А. Е. Сурков, Л. М. Литвиненко, А. Г. Миронова, Высокоплотный керамический материал Gd2Zr2O7 со структурой пирохлора для экологически безопасной изоляции РАО (2015)
2. П. Г. Гагарин, Термодинамические функции соединений и твердых растворов оксидов лантаноидов и диоксида циркония (2018)

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ КОМПОНЕНТОВ В КВАРЦЕВОМ ПЕСКЕ МЕТОДОМ РЕНТГЕНОФЛУОРЕСЦЕНТНОГО АНАЛИЗА

Шаденко И.П.[1], Абрамов А.В.[1], Чекунова А.А.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
E-mail: shadenko-2001@mail.ru

DETERMINATION OF THE COMPONENT CONTENT IN QUARTZ SAND BY XRF

Shadenko I.P.[1], Abramov A.V.[1], Chekunova A.A.[1]
[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia

A technique for determining the chemical composition of quartz sand has been developed. Metrological characteristics of the technique are determined.

Кварцевый песок является важным материалом в стекольной и цементной промышленности. Имеющиеся примеси в кварцевом песке оказывают существенно влияние на свойства изготавливаемой продукции. В настоящее время чаще всего примеси в кварцевом песке анализируют при помощи рентгенофлуоресцентной спектрометрии.

Целью данной работы является разработка методики определения компонентов (Al, Cr, Fe, K, Na, Mg, S, Ca, Ti, Cl, Mn) в кварцевом песке.

Методика разрабатывалась с использованием волнодисперсионного спектрометра ARL ADVANT’X 4200W. Разработаны образцы для построения градуировочной зависимости методом высокотемпературного растворения во флюсе[1] (тетрабората лития и метабората лития в соотношении 1:1) с использованием прибора «KATANAX PRIME K1».Выбраны аналитические линии определяемых элементов с учётом, что сигналы должны быть максимальны по интенсивности и свободны от наложений. Построены градуировочные зависимости с помощью программного обеспечения OXSAS. Проведена оценка метрологических показателей. Созданная методика позволяет определять химический состав кварцевого песка с широким диапазоном содержания примесей.

1. Рентгенофлуоресцентный силикатный анализ / В. П. Афонин, Т.Н. Гуничева, Л.Ф.Пискунова; под редакцией д-р физ.-мат. наук Н.Ф.Лосева ¬ Новосибирск: Изд-во Наука 1984 ¬ 226с.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ СОВМЕСТНОГО ВЫДЕЛЕНИЯ СТРОНЦИЯ, БАРИЯ, ЛАНТАНА И УРАНА ИЗ ХЛОРИДНЫХ РАСПЛАВОВ МЕТОДОМ ФОСФАТНОГО ОСАЖДЕНИЯ

Шарипова М.М.[1], Иванов А.Б.[1], Волкович В.А.[1], Малышев А.С.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: chuvasch@yandex.ru

STUDY OF THE POSSIBILITY OF REMOVING STRONTIUM, BARIUM, LANTHANUM AND URANIUM FROM CHLORIDE MELTS BY THE PHOSPHATE PRECIPITATION METHOD

Sharipova M.M.[1], Ivanov A.B.[1], Volkovich V.A.[1], Malyshev A.S.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Precipitation of strontium/barium, lanthanum and uranil phosphates from LiCl–KCl, NaCl–KCl–CsCl, NaCl–KCl melts by reaction with Na_3PO_4 was investigated at 750°C and 550°C.

Ранее [1–5] рассмотрено образование фосфатов бария, стронция и редкоземельных элементов из расплавов хлоридов щелочных металлов. Осаждение проводилось добавлением фосфата натрия в солевой расплав. Для полученных частиц определены фазовый состав и размеры частиц фосфатов.

В данной работе объектами исследований выбраны следующие смеси: эвтектическая смесь LiCl–KCl (550 °C), эвтектическая смесь NaCl–KCl–CsCl (550 °C), эквимольная смесь NaCl–KCl (750 °C). Данные смеси также содержат в своём составе хлорид бария ($BaCl_2$), либо стронция ($SrCl_2$), а также хлорид лантана ($LaCl_3$) и уранилхлорид (UO_2Cl_2). В ходе экспериментов в расплавы вводилось разное количество фосфата натрия (Na_3PO_4) в качестве реагента осадителя. Расплавы находились в атмосфере аргона и не подвергались принудительному перемешиванию.

Мольное отношение PO_4^{3-}:(Ba^{2+}/Sr^{2+}+La^{3+}+UO_2^{2+}) варьировалось в диапазоне от 0,5 до 3 с целью определения избытка фосфата натрия, необходимого для полного перевода бария, стронция лантана и уранил иона из расплава в форму фосфатного осадка.

Полученные осадки отделены от солевого электролита, с целью определения размера частиц фосфатов с помощью лазерного гранулометрического анализатора ANALYSETTE 22 NanoTec plus с использованием приставки Wet Dispersion Unit. В процессе измерений применялась ультразвуковая обработка образцов.

Пример распределения частиц по размерам в зависимости избытка реагента осадителя приведён на рисунке 1.

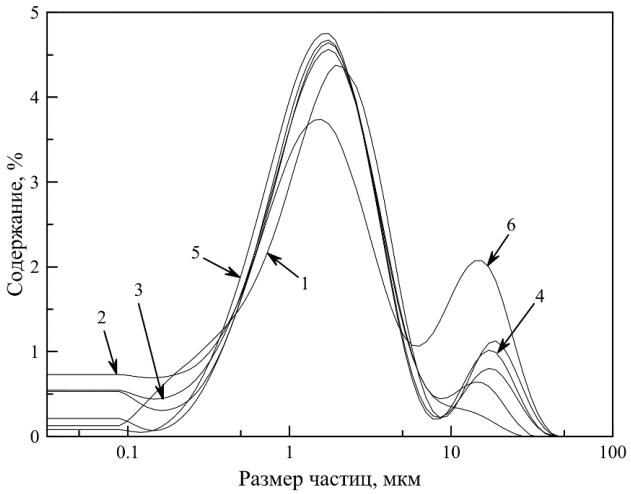


Рис. 1. Распределение частиц смеси фосфатов стронция, лантана и фосфата уранила по размеру в зависимости от исходного мольного отношения фосфат ионов к ионам Sr^{2+}, La^{3+}, UO_2^{2+} в расплаве на основе NaCl–KCl.

Идентификацию полученных фосфатов проводили методом рентгенофазового анализа на дифрактометре X'Pert PRO ($Cu_{K\alpha}$ излучение с β-фильтром (Ni) на вторичном пучке). Расшифровку дифрактограмм осуществляли с использованием программы полнопрофильного анализа Ритвельда и картотеки PDF-2.

Данная работа выполнена при поддержке совета по грантам Президента Российской Федерации СП-2021.

1. А. Б. Иванов, Е. Д. Бызова, В. А. Волкович, А. В. Чукин, “Образование фосфатов бария и стронция в хлоридных расплавах”, Расплавы, 2021, (3), 284-293.
2. A. B. Ivanov, E. D. Byzova, V. A. Volkovich, A. V. Chukin, and T. R. Griffiths, “Application of Phosphate Precipitation for Removing Strontium and Barium from Alkali Chloride Based Melts”, ECS Transactions, 2020, 98(10), 283-294.
3. A. B. Ivanov, V. V. Sukhikh, V. A. Volkovich, B. D. Vasin, A. V. Chukin, “Formation of rare-earth element phosphates in the melts based on the equimolar mixture of sodium and potassium chlorides”, Russian Metallurgy, 2019, (2), 152-154.
4. V. A. Volkovich, A. B. Ivanov, A. V. Chukin, V. V. Sukhikh, T. R. Griffiths, “Formation of rare earth phosphates in the melts based on NaCl–KCl equimolar mixture”, ECS Transactions, 2018, 86(14), 329-340.
5. V. V. Sukhikh, A. B. Ivanov, V. A. Volkovich, B. D. Vasin, A. V. Chukin and T. R. Griffiths, “Structure of rare earth phosphates formed in the melts based on the equimolar mixture of sodium and potassium chlorides”, AIP Conference Proceedings, 2018, 2015, 020099 (1-6).

ЭЛЕКТРОТЕРМИЧЕСКОЕ АТОМНО-АБСОРБЦИОННОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ГАЛЛИЯ ПОСЛЕ ЕГО КОНЦЕНТРИРОВАНИЯ НА СУСПЕНЗИИ МЕХАНОАКТИВИРОВАННОГО АНАТАЗА

Зайцева П. В.[1], Шатунов Д. Е.[2], Коробицына А.Д.[1], Васильева Н. Л.[2], Печищева Н. В.[1]
[1)] Институт металлургии УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: shatunov_dmitriy@inbox.ru

ELECTROTHERMAL ATOMIC ABSORPTION DETERMINATION OF GALLIUM AFTER CONCENTRATION ON A SUSPENSION OF MECHANICALLY ACTIVATED ANATASE

Zaitceva P. V.[1], Shatunov D. E.[2], Korobitsyna A. D[1], Vasil'eva N. L.[2], Pechishcheva N.V.[1]
[1)] Institute of Metallurgy of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia
[2)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The use of a suspension of mechanically activated anatase for the sorption of gallium from solutions is was shown to be promising. The conditions for atomic absorption with electrothermal atomization determination of gallium in an aqueous solution and adsorbed on a suspension are determined.

Определение низких содержаний галлия в рудном сырье и продуктах его переработки является непростой аналитической задачей. Для устранения матричных влияний предложено использовать сорбцию галлия на диоксиде титана. Введение сорбента в виде суспензии обладает рядом преимуществ по сравнению с введением в сухом виде [1].

В данной работе экспериментально исследован процесс сорбции галлия на суспензии механоактивированого TiO_2 (исходный TiO_2 - Е 171, ТМ Xinhua, Chongqing Xinhua Chemical Co, Ltd., Китай). 100 % анатаз после высокоэнергетического размола представляет собой смесь анатаза (примерно 75 масс. %) и рутила (примерно 25 масс. %).

Суспензию TiO2 получали аналогично работе [1]. В ходе настоящей работы установлено, что воспроизводимую и стабильную во времени суспензию можно получить, если при отделении от крупных частиц один фильтр «белая» лента использовать не более чем для 30 мл исходной суспензии.

Для определения условий сорбции ионов галлия (III) на полученной суспензии экспериментально изучили: зависимость степени сорбции галлия от соотношения массы механоактивированного TiO_2 к массе галлия (рис. 1, а) и зависимость степени сорбции галлия от pH суспензии (рис. 1, б). Установлено,

что степень сорбции галлия максимальна при pH = 4, но она близка к pH начала осаждения галлия из раствора. Поэтому далее готовили суспензию с pH = 3 и массовым соотношением $mTiO_2/mGa = 480$.

Для выбора условий определения галлия с помощью атомно-абсорбционного спектрометра AAnalyst 800 фирмы Perkin Elmer с электротермической атомизации получили кривые пиролиза (рис. 1, в) и атомизации (рис. 1, г) для водного раствора галлия и галлия, адсорбированного на суспензии. В графитовую печь дозировали 20 мкл раствора или суспензии, содержащего 1 нг галлия.

Согласно рис. 1, а температура стадии пиролиза для адсорбированного галлия на суспензии составляет 1000 °C, а для водного раствора – 500 °C. При этом температура стадии атомизации одинаковая (рис. 1, г). Можно предположить, что TiO_2 выступает в роли химического модификатора при определении галлия. С использованием подобранных температурно-временных программ (ТВП) нагрева печи было определено содержание галлия после сорбции при дозировании в графитовую печь непосредственно суспензии и раствора, полученного растворением диоксида титана с сорбированным на нем галлием. Полученные результаты близки, что говорит о правильности выбора ТВП и возможности определения галлия сразу из суспензии, исключая стадию десорбции.

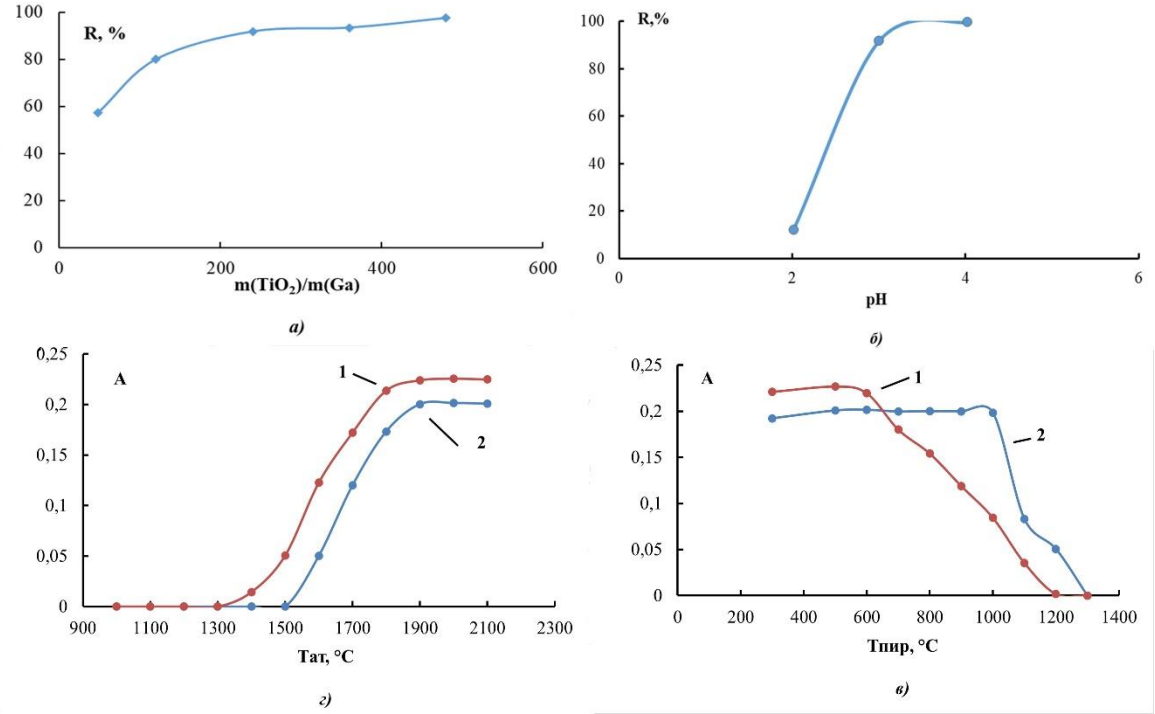


Рис. 1. а) Зависимость степени сорбции галлия от отношения массы диоксида титана к массе галлия. б) Зависимость степени сорбции галлия от pH суспензии. в) Кривая пиролиза. г) Кривая атомизации. 1 – для водного раствора галлия 2 – для адсорбированного галлия на суспензии TiO_2.

В ходе работы установили, что суспензия механоактивированого TiO_2 (исходный TiO_2 - Е 171) является перспективной в качестве сорбента для сорбции галлия из различных растворов с последующем его атомно-абсорбционным определением. Подобраны условия для электротермического атомно-абсорбционного определения галлия адсорбированного на суспензии диоксида титана.

Работа выполнена по Государственному заданию ИМЕТ УрО РАН (№122013100200–2).

1. N.V. Pechishcheva, P.V.Zaitceva, A.D. Korobitsyna, AIP Conference Proceedings, 2466, 050028 (2022).

СОРБЦИОННОЕ ИЗВЛЕЧЕНИЕ ИОНОВ СЕРЕБРА ИЗ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ РАСТВОРОВ НА МОДИФИЦИРОВАННОМ ПОЛИСИЛСЕСКВИОКСАНЕ

Щербинин П.А.[1], Мельник Е.А.[1, 2], Осипова В.А.[3], Пестов А.В.[3], Холмогорова А.С.[1], Неудачина Л.К.[1]

[1)] Уральский Федеральный Университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина. г. Екатеринбург, Россия

[2)] УНИИМ-филиал ФГУП «ВНИИМ им. Д. И. Менделеева». г. Екатеринбург, Россия

[3)] Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского, РАН. г. Екатеринбург, Россия

E-mail: Pasha.sherbinin99@gmail.com

SORPTION EXTRACTION OF SILVER IONS FROM MULTIPLE-COMPONENT SOLUTIONS ON MODIFIED POLYSILSESCUIOXANE

Shcherbinin P.A.[1], Melnik E.A.[1, 2], Osipova V.A.[3], Pestov A.V.[3], Kholmogorova A.S.[1], Neudachina L.K.[1]

[1)] Ural Federal University. Yekaterinburg, Russia

[2)] USRIM- branch FSUE «RRIM named after D.I. Mendeleev». Yekaterinburg, Russia

[3)] Institute of Organic Synthesis named after I.Y. Postovsky RAS. Yekaterinburg, Russia

In this work, we studied the sorption of silver(I) ions from ammonium-acetate solutions containing transition and alkaline earth metal ions. The effect of pH in the range from 0 to 8 on the degree of ion sorption was studied.

Современные органо-неорганические материалы, функционализированные серосодержащими группами, являются перспективными сорбентами для извлечения благородных металлов из многокомпонентных растворов. Поэтому область, связанная с синтезом новых модифицированных сорбентов и оценкой их свойств, представляет интерес для изучений [1].

Исследуемый в настоящей работе – тиокарбамоилированный поли((2-аминоэтил)-3-аминопропилсилсесквиоксан) (ТКАЭАППСС) с концентрацией привитых тиомочевинных групп – 3,53 ммоль/г. Изучение сорбционных свойств ТКАЭАППСС проводили в статическом режиме, для этого готовили растворы, содержащие ионы: Ag^{+}, Ni^{2+}, Cu^{2+}, Ca^{2+}, Pb^{2+}, Fe^{3+}, Mg^{2+}, Mn^{2+}, Co^{2+}, Cd^{2+} и Zn^{2+} ($C_{Me}^{z+}= 1\cdot10^{-4}$ моль/дм^3). Кислотность каждого раствора создавали при помощи аммиачно-ацетатной буферной системы или азотной кислоты. В конические колбы отбирали навески ТКАЭАППСС массой 0,0500 г и приливали 50,0 см^3 раствора с соответствующим значением pH. Спустя три дня осуществляли фильтрование и определяли концентрацию ионов металлов в растворах до и после сорбции методом атомно-абсорбционной спектрометрии. По полученным данным построена зависимость сорбции ионов металлов от кислотности среды (рис. 1).

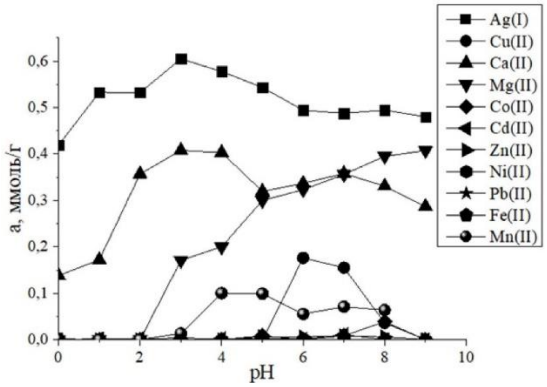


Рис. 1. Влияние pH раствора на сорбцию ионов металлов

На основании экспериментальных данных можно сделать вывод о преимущественном извлечении Ag^+ во всем исследуемом диапазоне pH. Практически количественное извлечение Ag^+ реализуется в диапазоне pH от 1 до 5, в сильнокислой среде наблюдается понижение сорбции, что связано с увеличением концентрации H^+ в растворе. Однако совместно с ионами серебра при pH>3 сорбируются Cu^{2+}, Ca^{2+}, Mg^{2+} и Mn^{2+}, остальные ионы не извлекаются. Сорбция Ca^{2+} и Mg^{2+} может протекать за счет их взаимодействия ионов с гидроксильными группами матрицы сорбента [2].

Дополнительно проведена сорбция в динамическом режиме. Через патрон ДИАПАК, содержащий 0,1000 г ТКАЭАППСС, пропускали аналогичный модельный раствор с pH=1. По динамическим выходным кривым сделан вывод о преимущественной сорбции ионов серебра на фоне мешающих ионов. Проскок ионов серебра наблюдается при пропускании 30 $см^3$ раствора, однако полное насыщение сорбента ионами серебра не происходит даже при пропускании 150 $см^3$ раствора, в то время как насыщение мешающими ионами осуществляется уже после 90 $см^3$. Десорбция серебра с поверхности сорбента проведена путем пропускания серии сернокислых растворов тиомочевины с градиентом концентрации тиомочевины от 0,5 до 5 %, суммарная степень выделения серебра составила 72,2 %.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Программы развития Уральского федерального университета имени первого Президента России Б.Н. Ельцина в соответствии с программой стратегического академического лидерства "Приоритет-2030"

1. Functionalization of magnetic chitosan microparticles – Comparison of trione and trithione grafting for enhanced silver sorption and application to metal recovery from waste X-ray photographic films / Hamza M. F. [et al.] // Journal of Environmental Chemical Engineering. 2022. V. 10. P. 107939.
2. Громов В. В., Спицын В. И. Изучение сорбционных свойств силикагеля, облученного нейтронами // Атомная энергия. – 1963. – Т. 14, В. 5. – С. 491–493.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ V, As, Fe, Cl И ДРУГИХ КОМПОНЕНТОВ В ВАНАДИЕВЫХ КАТАЛИЗАТОРАХ

Шихалеева М.А.[1], Абрамов А.В.[1], Печищев И.В.[1], Устьянцев Ю.Г.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
E-mail: marisha.shikhaleeva@mail.ru

DETERMINATION OF V, As, Fe, Cl AND OTHER COMPONENTS IN VANADIUM CATALYSTS BY XRF

Shikhaleeva M.A.[1], Abramov A.V.[1], Pechishchev I.V.[1], Ustiantsev U. G.[1]
[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia

A technique has been developed for the determination of V, As, Fe, Cl and other chemical elements in vanadium catalysts using X-ray fluorescence analysis. The obtained technique makes it possible to assess the quality of initial vanadium catalysts.

Одним из этапов производства контактной серной кислоты является окисление сернистого ангидрида до серного в присутствие ванадиевого катализатора. Согласно ТУ 48-0323-6-90 [1] единственным техническим требованием, предъявляемым к исходному химическому составу катализаторов на основе природных кремнеоксидных материалов, является значение массовой доли V_2O_5, составляющее не менее 6,5–7,5 %, в зависимости от марки катализатора. В настоящее время на производстве определение массовой доли V_2O_5 проводят методом окислительно-восстановительного титрования. Однако стоит отметить, что современные запросы к качеству производимых катализаторов требуют контролировать также содержание вредных примесных компонентов, которые в процессе производства способствуют снижению каталитической активности исследуемого материала, к ним относят As, Fe и Cl.

Целью данного исследования являлось создание методики определения содержания ванадия, мышьяка, железа, хлора, а также четырнадцати компонентов (Si, S, K, Cs, Na, Al, Ca, Mg, Mn, P, Ti, Cu, Ni, Zn) в образцах ванадиевых катализаторов.

Методика разрабатывалась с использованием волнодисперсионного спектрометра ARL ADVANT’X 4200. В процессе исследования было приготовлено 6 градуировочных образцов методом прессования, были выбраны условия возбуждения и регистрации аналитического сигнала для каждого исследуемого элемента, построены градуировочные зависимости. Также была проведена сравнительная оценка результатов содержания ванадия в катализаторах, полученных двумя разными методами: рентгенофлуоресцентным спектральным анализом и титриметрическим анализом.

1. ТУ 48-0323-6-90. Катализаторы окисления сернокислотного производства. Изменение № 4. АО «Техметалл-2002». 2017.

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ ИОНОВ УРАНИЛА В РАСПЛАВАХ НА ОСНОВЕ FLiNaK

Смирнова В.В.[1], Волкович В.А.[1]
[1)] Уральский федеральный университет, физико-технологический институт 620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 21
E-mail: zakharova.viktoria@urfu.ru

ELECTROCHEMICAL BEHAVIOR OF URANYL IONS IN FLiNaK-BASED MELTS

Smirnova V.V.[1], Volkovich V.A.[1]
[1)] Ural Federal University, Institute of Physics and Technology 620002, Yekaterinburg, st. Mira, 21

The study of the electrochemical behavior of uranyl fluoride in the melt of the LiF-NaF-KF eutectic mixture at a temperature of 550-590°C and a uranyl concentration of 1-3 wt. %, by methods of cyclic, square-wave voltammetry and chronopotentiometry

Фторидные расплавы могут быть использованы в качестве топливных композиций в жидкосолевых реакторах (ЖСР), основой расплавов выступают смеси фторидов лития, натрия и калия (FLiNaK) или фториды лития и бериллия (FLiBe). Расплавы на основе эвтектической смеси FLiNaK, в частности, являются перспективными рабочими средами жидкосолевых реакторов-сжигателей, предназначенных для трансмутации минорных актинидов и долгоживущих продуктов деления. В качестве метода разделения компонентов отработавшего ядерного топлива (ОЯТ) ЖСР можно использовать электролиз. В присутствии кислородных или оксидных примесей часть урана в фторидном расплаве может быть окислена до высшей степени окисления и присутствовать в форме ионов уранила. Электрохимическое поведение соединений уранила в фторидных расплавленных электролитах изучено слабо, поэтому целью настоящей работы явилось исследование растворов UO_2F_2 в расплавах эвтектической смеси LiF–NaF–KF.

Эксперименты проводили при 550–590°C в герметичной кварцевой ячейке в атмосфере аргона. В качестве методов исследования были выбраны циклическая и квадратно-волновая вольтамперометрия и хронопотенциометрия. Данные методы отличаются экспрессностью, позволяют получить информацию о значениях потенциалов, при которых протекают электрохимические реакции, стадийности и механизме электродных процессов, транспортных свойствах электроактивных соединений. Рабочим электродом и квазиэлектродом сравнения служили вольфрамовые стержни, а в качестве противоэлектрода использовали стержень из стеклоуглерода. Концентрацию фторида уранила в электролите

варьировали в диапазоне 1–3 мас. %. На рисунке представлен пример циклических вольтамперограмм, зарегистрированных в расплаве при 573 °С.

На циклических вольтамперограммах присутствуют один хорошо выраженный катодный и два анодных пика при потенциалах около –0,75, –0,2 и 0,3 В, соответственно. Катодный пик соответствует осаждению твёрдого диоксида урана UO_2. Анодные волны можно отнести к двухстадийному окислению диоксида урана: $UO_2 \rightarrow UO_2^{+} \rightarrow UO_2^{2+}$. На основании полученных вольтамперограмм сделан вывод, об обратимости реакции. Результаты, полученные методом циклической вольтамперометрии, хорошо согласуются с квадратно-волновыми вольтамперограммами.

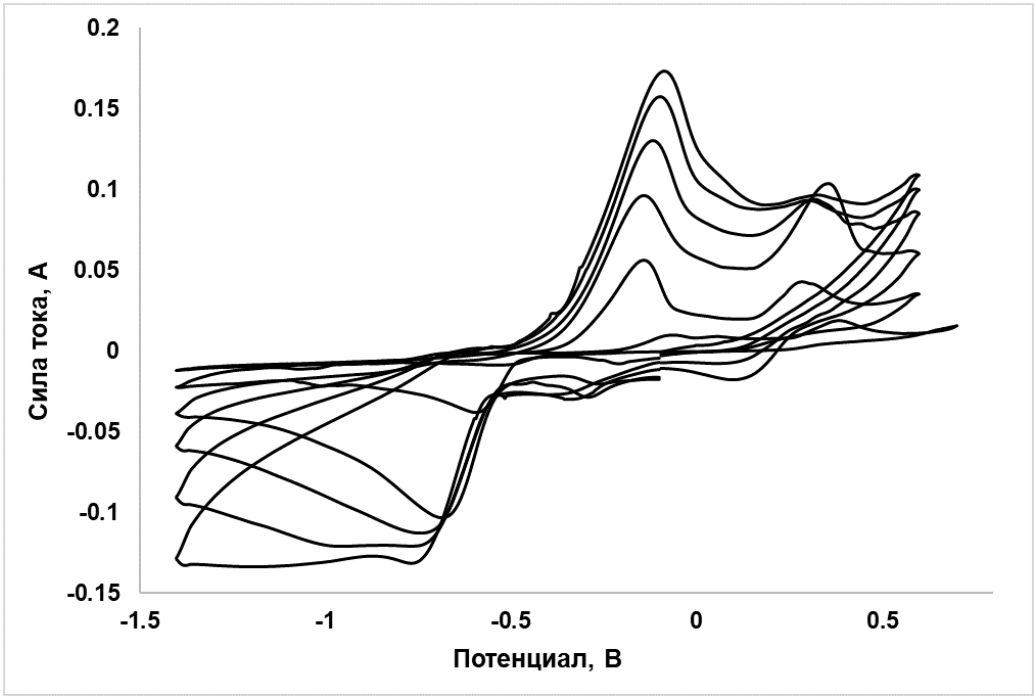


Рис. 1. Скорость поляризации рабочего электрода (начиная изнутри) 0.04, 0.1, 0.2, 0.5, 1, 2 В/с Рисунок 1 –Циклические вольтамперограммы, зарегистрированные в расплаве LiF–NaF–KF– UO_2F_2 (2 мас.%) при 573 °С и различных скоростях поляризации рабочего электрода.

SYNTHESIS OF STABILIZED ALUMINUM OXIDE FOR APPLICATION AS A SUPPORT FOR AUTOMOBILE CATALYST

Solodovnikova P.A.[1], Mashkovtsev M.A.[1], Galiaskarova M.R.[1], Rychkov V.N.[1], Akulov A.V.[1]

[1)] Ural Federal University named after the First President of Russia B.N. Yeltsin, Institute of Physics and Technology

E-mail: sol_polina@e1.ru

Today in Russia there is no production of gamma-aluminum oxide for use as part of automobile catalysts. Our technology makes it possible to obtain lanthanum-modified aluminum oxide with the required high specific surface area, thermal stability and developed porous structure.

Aluminum oxide is widely used in industry due to its unique property – a colossally large specific surface area. In particular, aluminum oxide is used as a carrier of precious metal catalysts in the internal combustion engine system [1]. However, in real operating conditions, where operating temperatures reach 1000 – 1100 ° C, the specific surface area of such a material decreases catastrophically. In order to prevent this effect, which is not desirable from the point of view of the quality of the automotive catalyst, surface-stabilizing additives or modifiers are used. The effect of the modifier largely depends on the properties of the initial aluminum oxide systems and methods of introducing additives, their quantity and heat treatment conditions. All these factors determine the mechanism of interaction of the introduced elements with aluminum oxide and, consequently, the direction and effectiveness of their influence on the properties of stabilized aluminum oxide [2].

In the course of the work, aluminum hydroxides were synthesized by controlled two-jet deposition with their subsequent decomposition to oxides. At the same time, the variable parameters were: deposition pH value, percentage and method of introducing the modifier (lanthanum oxide), firing temperature, composition of the feedstock.

The studied parameters were the samples specific surface area and porosity, as well as aluminum oxide viscosity in the working suspension.

The conducted studies allows to obtain aluminum oxide samples with an optimal specific surface area/viscosity ratio.

The authors express their gratitude to the company "Ecoalliance" LLC and personally to engineer E.O. Baksheev for assistance in testing samples as part of automotive catalysts. Grant support for the research was provided by the state non-profit organization "Foundation for the Promotion of Innovation".

1. Pakhomov N.A. Scientific bases of preparation of catalysts: an introduction to theory and practice / N.A. Pakhomov; ed. V.A. Sadykov. Russian Academy of Sciences,

Siberian Branch, Institute of Catalysis named after G.K. Boreskov. - Novosibirsk: Publishing House of SB RAS, 2011
2. Ozawa M., Kimura M., Isogai A. Thermal stability and characterization of γ -Al2O3 modified by rare earths // J.Less-CommonMetals. - 1990. - Vol.162, N 2. - P. 297 – 308

РАСЧЕТНО-ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ГАЗИФИКАЦИИ КОКСОВОГО ОСТАТКА БИОМАССЫ

Спиридонов К.Е.[1], Никитин А.Д.[1], Рыжков А.Ф.[1]
[1)] Уральский Федеральный Университет, Екатеринбург, Россия
E-mail: spiridonov_ke@mail.ru

EXPERIMENTAL AND COMPUTATIONAL STUDY OF BIOCHAR GASIFICATION

Spiridonov K.E.[1], Nikitin A.D.[1], Ryzhkov A.F.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

An experimental study of the kinetics of biochar gasification in a steam and carbon dioxide flow with the different concentration of oxidizing agent was carried out by the thermogravimetric analysis. In the absence of diffusion restrictions, the gasification reaction order by oxidizer is zero.

В настоящее время большое внимание уделяется снижению антропогенного воздействия на климат. Перспективным направлением является использование в производственном цикле биомассы, а также отходов сельскохозяйственной и лесоперерабатывающей промышленности. Эффективным направлением использования биомассы является ее газификация, в результате которой получается синтез-газ, состоящий из водорода и монооксида углерода. Синтез-газ из биомассы может использоваться в химической промышленности для синтеза аммиака, метанола и других веществ, что приведет к сокращению потребления природного газа, который сейчас является основным сырьем для производства синтез-газа. Для разработки реакторов для газификации биомассы необходимы достоверные данные для расчета скорости этого процесса. Имеющиеся в литературе значения кинетических констант для реакций газификации коксового остатка биомассы изменяются в широком диапазоне: от 300 до 50 кДж/моль [1-3]. Такое расхождение объясняется необходимостью учета диффузионных ограничений и теплообмена при определении кинетических констант по экспериментальным данным.

Целью данной работы является получение достоверных кинетических констант для расчета газификации коксового остатка соснового опила при взаимодействии с водяным паром и углекислым газом. Экспериментальные исследования проводились на опиле фракции 0,25-0,5 мм. Пиролиз опила осуществлялся в предварительно нагретой муфельной печи при температуре 900°C в течение 10 минут. Газификация коксового остатка опила проводилась на приборе термогравиметрического анализа NETZSCH STA 449F3. Проба массой около 200 мг засыпалась в тигель с внутренним диаметром 18 мм и образовывала слой высотой около 10 мм. Проведены серии динамических опытов в среде H_2O-

Ar и CO_2-Ar при варьировании концентрации окислителя (11, 25, 33, 50 % об.). Расход смеси газов составлял 8 л/ч. Проба нагревалась до 1000°С со скоростью 15°С/мин. В результате опытов получены кривые убыли массы.

В ходе обработки результатов опытов рассчитаны внешнедиффузионная константа скорости реакции и фактор эффективности, характеризующий глубину проникновения окислителя в слой пробы, что позволило выделить границы кинетического, внутри- и внешнедиффузионного режимов газификации. В результате обработки экспериментальных данных показано, что во внешнедиффузионном режиме порядок реакции газификации по окислителю равен единице, в кинетическом режиме порядок реакции газификации по окислителю равен нулю. На основе полученных данных предложена упрощенная математическая модель для расчета скорости паровой и углекислотной газификации опила в масштабах реактора.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Программы развития Уральского федерального университета имени первого Президента России Б.Н. Ельцина в соответствии с программой стратегического академического лидерства "Приоритет-2030".

1. C. Schneider et al., Fuel 299, 120523 (2021).
2. P. Grzywacz et al., E3S Web of Conferences 10, 00026 (2016).
3. L. Lin, M. Strand, Applied Energy 109, 220–228 (2013).

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НИКЕЛЯ В РАСПЛАВЕ LiF-NaF-KF

Степанова М.Ю.[1], Смирнова В.В.[1], Волкович В.А.[1]
[1)] Уральский федеральный университет 620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 21
E-mail: rte225.stepanova@yandex.ru

ELECTROCHEMICAL PROPERTIES OF NICKEL IN THE LiF-NaF-KF MELT

Stepanova M.Yu.[1], Smirnova V.V.[1], Volkovich V.A.[1]
[1)] Ural Federal University 620002, Yekaterinburg, Mira str., 21

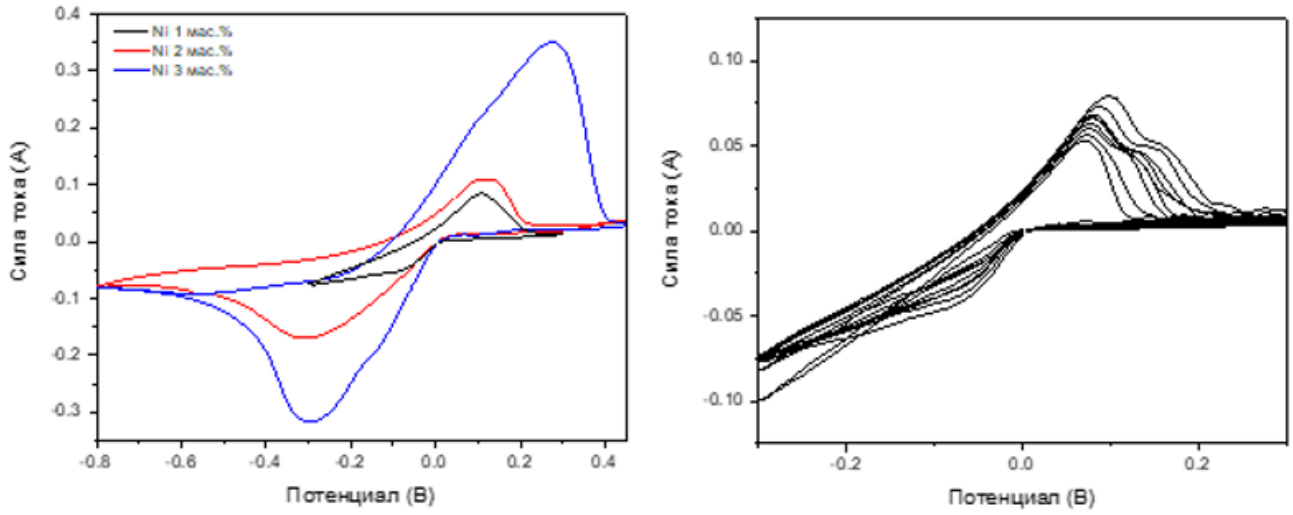
The study of the electrochemical behavior of nickel fluoride in melts of the eutectic mixture LiF-NaF-KF at a temperature of 556-568 °C and nickel concentrations of 1, 2 and 3 wt. % by cyclic, rectangular voltammetry and chronopotentiometry methods.

В настоящее время на рынке ядерных технологий активно разрабатывается технология замыкания топливного цикла. Для этого необходимо выделять из радиоактивных отходов и утилизировать долгоживущие радиоактивные компоненты, которые включают минорные актиниды: америций, кюрий, нептуний. Жидкосолевой реактор (ЖСР) является перспективным реактором-дожигателем, который будет решать проблему актинидов и их утилизации в промышленных масштабах. Его создание невозможно без детальной информации о свойствах и поведении не только компонентов ядерного топлива, но и продуктов коррозии конструкционных материалов в рабочих расплавах. В качестве основных конструкционных материалов рассматривают сплавы на основе никеля. Наиболее подходящими солевыми композициями для ядерного топлива и теплоносителя являются смеси фторидов металлов – LiF–BeF_2 и LiF–NaF–KF. Поэтому изучение поведения никеля и его соединений в фторидных расплавах является актуальной задачей.

Эксперименты проводили в расплавах на основе тройной эвтектической смеси LiF–NaF–KF, содержащей фторид никеля. Концентрация NiF_2 составляла 1, 2 или 3 мас. %. В качестве методов исследования были выбраны нестационарные электрохимические методы – циклическая и квадратно-волновая вольтамперометрия. Для работы использовали герметичную кварцевую электрохимическую ячейку, заполненную аргоном. Трёхэлектродная система состояла из вольфрамового рабочего электрода, вольфрамового квази-электрода сравнения и противоэлектрода из стеклоуглерода. Измерения проводили в интервале температуры 556÷568 ºС.

В ходе работы была выполнена регистрация вольтамперограмм в интервале потенциалов от 0 до –0,8 В в катодной области, и от 0 до 0,45 В в анодной области.

Скорость поляризации рабочего электрода изменяли в диапазоне от 0,01 до 0,1 В/с. Примеры циклических вольтамперограмм представлены на рисунке 1.



а б

Рис. 1. Циклические вольтамперограммы при разных концентрациях Ni и скорости поляризации 0,1 В/с (а) и при различных скоростях поляризации рабочего электрода (начиная изнутри 10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80, 90, 100, мВ/с) в расплаве LiF–NaF–KF–NiF2(1 мас.%) при 568 °С (б)

На вольтамперограмме виден один катодный и один, связанный с ним, анодный пик. Форма пиков указывает на выделение и последующее растворение твердой фазы, и соответствует реакции $Ni^{2+} \rightarrow Ni^{0}$.

Установлено, что при увеличении концентрации фторида никеля в расплаве закономерно возрастает интенсивность пиков (рис. 1а). Сделан вывод, об обратимости электрохимической реакции, контролируемой диффузией. Рассчитаны коэффициенты диффузии ионов никеля в расплавленном электролите и число электронов, принимающих участие в реакции. Результаты, полученные методом циклической вольтамперометрии хорошо согласуются с результатами квадратно-волновой вольтамперометрии.

СОРБЦИОННО-СПЕКТРОСКОПИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ИОНОВ КАДМИЯ (II)

Стрельцова Х.И.[1], Лакиза Н.В.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: streltsova.khristina@yandex.ru

SORPTION-SPECTROSCOPIC DETERMINATION OF CADMIUM (II) IONS

Streltsova Kh.I.[1], Lakiza N.V.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The range of pH values in which the sorption of cadmium ions on KB-4 cationite proceeds most fully both in the presence of 4-(2-pyridylazo)resorcinol and without it has been determined. The possibility of developing a test method for determining the content of cadmium in solutions has been assessed.

Тест-методы экспрессного полуколичественного анализа объектов окружающей среды начали активно разрабатываться в начале XXI века [1]. К настоящему моменту разработаны тест-методы для определения в полевых условиях меди, свинца и некоторых других ионов металлов [2-4]. Обычно тест-системы представляют собой набор из твердой фазы (бумага или стеклянная трубка, заполненная сорбентом), ампул с реактивами и цветной градуировочной шкалы.

Кадмий, как один из наиболее токсичных металлов, требует контроля содержания в объектах окружающей среды. В отличие от ионов меди, никеля, кобальта, взаимодействие данного сорта ионов с сорбентами не сопровождается видимыми изменениями, что не может быть использовано для разработки тест-метода. Эта проблема может быть решена образованием окрашенного смешанно-лигандного комплекса между ионами кадмия (II), функциональными группами ионита и органического реагента, присутствующего в сорбционном растворе. В качестве подобного реагента может быть использован 4-(2-пиридилазо)-резорцин (ПАР), образующий красно-оранжевые соединения с ионами металлов, а в качестве ионита – бесцветный промышленно выпускаемый катионит КБ-4 с карбоксильными группами. В связи с вышеизложенным целью работы является оценка возможности разработки тест-метода определения ионов кадмия (II).

Степень извлечения кадмия катионитом КБ-4 изучена в статических условиях методом ограниченного объема в зависимости от кислотности и присутствия в сорбционном растворе ПАР. Для регулирования pH растворов использовали аммиачную буферную систему. Содержание ионов кадмия в растворах до и после сорбции определяли спектрофотометрически по реакции с ПАР методом

градуировочного графика. На рисунке 1 представлены зависимости степени извлечения ионов кадмия от значения pH раствора в отсутствии и присутствии ПАР.

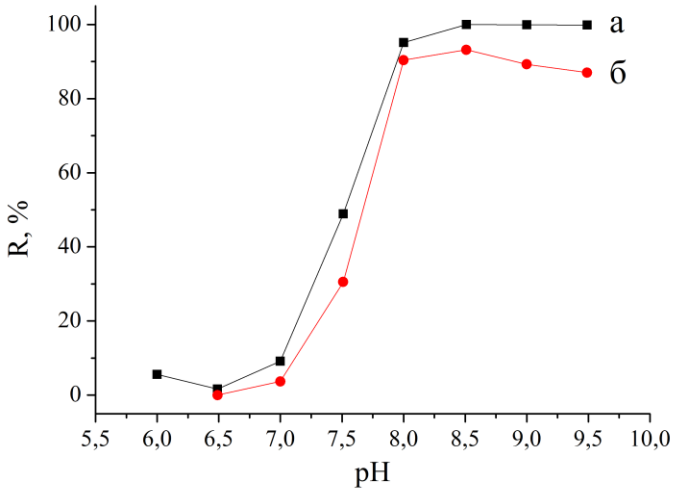


Рис. 1. Зависимость степени извлечения ионов кадмия катионитом КБ-4 от кислотности раствора в отсутствие (а) и в присутствии ПАР (б). Аммиачный буферный раствор, $m_К$ = 0,1000 г, V = 50,0 см^3, C^0(ПАР) = 2·10^{-4} моль/дм^3, $C^0(Cd^{2+})$ = 10^{-4} моль/дм^3

Из рисунка 1 видно, что присутствие в сорбционном растворе органического реагента несущественно влияет на извлечение кадмия катионитом, зависимости имеют схожий вид. Значительная сорбция ионов Cd (II) наблюдается при значениях pH > 7, наиболее полное извлечение происходит в интервале pH = 8,0–9,5. Следует отметить, что сорбционное извлечение ионов кадмия из раствора, содержащего ПАР, сопровождается видимым изменением окраски катионита. Это может быть использовано для разработки тест-метода определения содержания ионов кадмия.

1. Саввин С. Б., Дедкова В. П., Швоева О. П. Сорбционно-спектроскопические и тест-методы на твердой фазе ионообменных материалов / Успехи химии. 2000. Т. 69, № 3. С. 203–217.
2. Иванов В. М., Кочелаева Г. А. Сорбционно-спектрометрическое и тест-определение меди в водах / Вестник Московского университета. Сер. 2. Химия. 2001. Т. 42, № 2. С. 103–105.
3. Торопов Л. И. Тест-определение ионов свинца с сульфарсазеном / Современные проблемы науки и образования. 2011. № 6. С. 315.
4. Бобкова Л. А., Односторонцева Т. В., Козик В. В. Сорбционно-цветометрическое и тест-определение ионов марганца (II), кобальта (II), никеля (II) и меди (II) в природных водах / Ползуновский вестник. 2009. № 3. С. 209–214.

РАЗРАБОТКА И АПРОБАЦИЯ МЕТОДА ОПРЕДЕЛЕНИЯ СОДЕРЖАНИЯ Cs-137 В ПРИРОДНЫХ ВОДАХ

Суетина А.К.[1], Воронина А.В.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: annasuetina@mail.ru

DEVELOPMENT AND APPROVAL OF METHOD FOR CONTENT OF Cs-137 IN NATURAL WATERS

Suetina A.K.[1], Voronina A.V.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

A method for determining Cs-137 in natural waters using NKF-GDT sorbent was developed and approved. The radionuclide yield in the concentrate was 99,3±0,3%.

Для обеспечения радиационной безопасности человека и окружающей среды необходимо регулярное проведение радиоэкологического мониторинга природных вод и контроль выноса радионуклидов в грунтовые и подземные воды с территорий радиационно-опасных предприятий. Для проведения анализа требуются методы определения радионуклидов с низким пределом обнаружения. Одним из долгоживущих искусственных радионуклидов, загрязняющих природные воды, является Cs-137. Требуемый предел обнаружения радионуклида для разных условий составляет от 0,001 до 0,01 Бк/л.

Разработан метод определения Cs-137 в природных водах с низким пределом обнаружения. Исследовано концентрирование Cs-137 смешанным ферроцианидом никеля-калия на различных носителях: гидратированном диоксиде циркония (сорбент марки Т-35 производства АО «Неорганические сорбенты»), гидратированном диоксиде титана (НКФ-ГДТ [1]) и целлюлозе (НКФ-Ц). Сорбцию Cs-137 проводили в динамических условиях из проб природных вод объемом 10, 20 и 100 л. Установлена зависимость выхода цезия в концентрат от объема пробы, массы сорбента, скорости пропускания воды. Показано влияние типа носителя на эффективность регистрации концентрата на сцинтилляционном гамма-спектрометре и обеспечиваемый совокупностью условий анализа предел обнаружения радионуклида.

Метод определения Cs-137 с концентрированием цезия сорбентом НКФ-ГДТ (выход цезия в концентрат 99,3±0,3%) апробирован при проведении радиоэкологического мониторинга вод природных водоёмов и рек на территории Свердловской и Челябинской областей, а также вод контрольно-наблюдательных скважин ПХРО Свердловского отделения филиала «Уральский территориальный округ» ФГУП «ФЭО». Показано, что во всех пробах содержание Cs-137 не превышает уровень вмешательства для питьевой воды – 11 Бк/л.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (в рамках базовой части госзадания, проект № FEUZ-2023-0013).

1. Воронина А.В., Ноговицына Е.В., Семенищев В.С., Блинова М.О. Способ получения неорганического ферроцианидного сорбента (варианты). Патент на изобретение № 2746194.

СРАВНЕНИЕ СТРУКТУРНО-ДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ГАЗОДИСПЕРСНОГО ПОТОКА ДЛЯ РЕЖИМОВ ГОРЕНИЯ И ГАЗИФИКАЦИИ ДЛЯ РАЗЛИЧНЫХ ТОПЛИВ ВО ВЛАЖНОМ СОСТОЯНИИ

Суворин И.Д.[1, 2], Рыжков А.Ф.[1]
[1)] Уральский Федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина 620002, Свердловская область, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19
[2)] Группа компаний «ПЛМ Урал» Екатеринбург, 620131, ул. Металлургов, 16 Б
E-mail: suvorin.ig@yandex.ru

COMPARISON OF THE STRUCTURAL AND DYNAMIC CHARACTERISTICS OF A GAS-DISPERSED FLOW FOR COMBUSTION AND GASIFICATION MODES FOR VARIOUS FUELS IN A WET STAT

Suvorin I.D.[1, 2], Ryzhkov A.F.[1]
[1)] Ural Federal University the first President of Russia B. N. Yeltsin, Russia 620002 Ekaterinburg, Mira, 19
[2)] PLM Ural Group of Companies, Russia, 620131 Ekaterinburg, Metallurgov, 16 B

The paper analyzes the structural characteristics of gas-dispersed flows in the energy sector. According to the porosity values, using the balance ratios of heat and mass, the mass concentrations of particles of various fuels in the wet state are calculated at a stoichiometric fuel-air ratio.

Процессы в высококонцентрированных и низкоконцентрированных дисперсных потоках, лежащих в основе современных энергетических технологий сжигания и газификации твердых топлив, идут в активных гидродинамических режимах. Эти режимы отличаются высокой подвижностью газовой и дисперсной фаз, их активным перемешиванием и высокими показателями внутреннего и внешнего тепломассообмена. На структурно-динамические характеристики газодисперсного потока и на устанавливающийся гидродинамический режим в промышленном диапазоне давления и температур влияет тип топлива.

Найдем связь технических характеристик топлив с их расходной концентрацией в рабочем диапазоне порозностей высококонцентрированных и низкоконцентрированных потоков. Для сравнительного анализа характеристик были выбраны уголь (Кузнецкий и Бородинский), антрацит (Донецкий АШ), горючий сланец (Эстон-сланец), торф (Росторф), древесина (сосна) и лузга (подсолнечник). [1]

Массовая концентрация твердых частиц μ в газодисперсном потоке связана с объемной плотностью $\varphi_0=1-\varepsilon_0$ и порозностью ε_0 соотношением:

$\mu=(\varphi_0/\varepsilon_0)\cdot(\rho_{т}в/\rho_{г})$ [кг топлива/кг воздуха],

Массовая концентрация топливных частиц в исходной топливо-воздушной смеси рабочего состава перед конверсией задается по стехиометрическим соотношениям топливо-воздух:

$\mu_0=1/L^{0r}_{гф}\equiv1/V^0*\alpha_с т*\rho^0_В$ [(кг топлива)/(кг воздуха)], (2)

Здесь $L^{0r}_{г}ф$ [(кг воздуха)/(кг топлива)] – массовый стехиометрический расход воздуха на конверсию 1 кг рабочей массы топлива с коэффициентом расхода

V^0 [(нм^3 воздуха)/(кг топлива)] – объемный расход воздуха на стехиометрическое сжигание 1 кг топлива (при α=1) при нормальных условиях (1 бар, 273 К).

Для условной молекулы влажного топлива массой 1 кг стехиометрический расход воздуха на конверсию горючей массы до двухатомных газов H2 и CO найдется по формуле:

$\alpha_с т=(C/12-(2*O/16+W/18))/(2*C/12+0.5*(H/1+2*W/18)-(2*O/12+W/18))$

Для низкосортных топлив (древесина, торф, лузга) $\alpha_с т$ получается ниже ноля. Данные значения показывают, что газификация данных топлив во влажном состоянии протекать не может. В дальнейшем планируется провести расчет для сухого беззольного состояния топлива. а так же найти граничные значения температур и давлений быстрого псевдоожижения (ЦКС), плотного пневмотранспорта (ε^*=0,99) и разбавленного пневмотранспорта (ε^(**)=0,9997).

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Программы развития Уральского федерального университета имени первого Президента России Б.Н.Ельцина в соответствии с программой стратегического академического лидерства «Приоритет-2030».

1. Тепловой расчёт котельных агрегатов (Нормативный метод): Издание 2 – е переработанное. М.: Энергия, 1973. 296 с.

ИССЛЕДОВАНИЕ РЕСУРСОСБЕРЕГАТЕЛЬНОГО МЕТОДА СИНТЕЗА ВЫСОКОДИСПЕРСНОГО КАРБОНАТА КАЛЬЦИЯ

Тихонравов А.А.[1, 2], Богатов Н.А.[1, 2], Пентюхин Е.И.[1, 2], Савина А.С.[1, 2], Зоткин А.П.[1, 2]

[1)] Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева

[2)] Инжиниринговый центр «Автоматика и робототехника» МГТУ имени Н.Э. Баумана

E-mail: a.tikhonravov@bk.ru

STUDY OF A RESOURCE-SAVING METHOD FOR THE FINELY DISPERSED CALCIUM CARBONATE SYNTHESIS

Tikhonravov A.A.[1, 2], Bogatov N.A.[1, 2], Pentyukhin E.I.[1, 2], Savina A.S.[1, 2], Zotkin A.P.[1, 2]

[1)] D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia

[2)] Engineering Center "Automation and Robotics" Bauman Moscow State Technical University

The presented work relates to the studying the mass transfer effect creating finely dispersed calcium carbonate in a low energy exposure field. The use of the studied exposure has been experimentally established to have a positive effect on the resulting calcium carbonate.

Карбонат кальция применяют в промышленности в качестве наполнителя при производстве бумаги, пластмасс, зубных паст, а также как пищевой краситель (Е170). Существуют два метода его получения: добываемый в карьерах кальцит и конверсионный (синтетический), полученный путем химической реакции. В промышленности используют конверсионный карбонат кальция, что связано с его физическими характеристиками: оптимальный размер частиц (может варьироваться от микрометров до нанометров) и отсутствие примесей, негативно влияющих на степень белизны вещества [1].

В 2018 году на основании данных Минпромторга [2], конверсионный карбонат кальция на территории РФ не производился: организация отечественного производства затруднительна и мало рентабельна из-за отсутствия отечественных конкурентно способных методик синтеза. РФ стремится к полному импортозамещению производства конверсионного карбоната кальция, и к 2024 году процент отечественного карбоната кальция на рынке должен составлять 10% [3].

В настоящее время создание конверсионного карбоната кальция реализуется реакцией газообразного диоксида углерода с раствором гидроксида кальция и смешиванием растворов карбонат аммония и нитрата кальция [2]. Проведенное исследование основано на первом типе синтеза, в частности, изучении влияния нового метода обогащения раствора газом на основе патента RU 2489355 C2.

Метод, основанный на применении малоэнергетических воздействий, связан с образованием неоднородной концентрации и турбулентных течений внутри реакционной среды. Такой способ был выбран в качестве энергосберегательной альтернативы барботажу на основе работ [4, 5].

Для выявления эффективности методики был проведено экспериментальное исследование. Навеску сахарозы (100 г/л) растворяли в 200 мл дистиллированной воды, затем добавляли гидроксид кальция (от 5, до 10 г/л) и навеску ПАВ (сульфонол) в диапазоне 0,01% – 0,5%, считая на массу гидроксида кальция. Полученный раствор фильтровали и переливали 50 мл раствора в мерный цилиндр. Последующее воздействие проводилось в течение 5 минут для двух типов воздействия на раствор: барботаж и низкочастотное воздействие. Полученный осадок отфильтровывали, промыв его органическим растворителем и дистиллированной водой и проводили сушку синтезированного карбоната кальция.

Расчет размеров частиц производился по формуле Геллера. Где m относительная, безразмерная величина, с уменьшением которой растёт размер частиц. После низкочастотного воздействия - 0,6464, после барботажа - 0,6272. Был сделан контрольный образец, выполненный по методике патента RU 2489355 C2. Значение m составило 0,2573.

Экспериментально обнаруженный в работах [4, 5] эффект, может иметь практическое приложение для массообменных процессов в химической технологии. Полученный с применением такого метода синтетический карбонат кальция по своим размерам не уступает продукту, полученному с помощью барботирования, что позволяет использовать виброакустическое воздействие для промышленного получения ультрадисперсного мела.

1. Карбонат кальция. Лакпром [Электронный ресурс] http://lkmprom.ru/clauses/entsiklopediya/kaltsiya-karbonat-
2. Анализ западных химических технологий для локолизации в России. ИХТЦ [Электронный ресурс] https://ect-center.com/blog/technologies-for-localization
3. План мероприятий по импортозамещению в отрасли химической промышленности Российской Федерации. Утв. приказом Минпромторга России от 15 ноября 2022 г. № 4743 [Электронный ресурс] https://frprf.ru
4. Пентюхин Е. И., Богатов Н.А. Влияние низкочастотных малоэнергетических воздействий на pH водной реакционной среды // Физическое образование в ВУЗах. Т. 27, № S4, С. 27-30 (2021)
5. Зоткин А. П., Богатов Н.А. Интенсификация массообменного процесса в системе "газ-жидкость" при помощи инфразвукового воздействия // Физическое образование в ВУЗах. Т. 27, № S4, С. 51-54 (2021)

АНОДНОЕ РАСТВОРЕНИЕ ГАЛЛИЯ В ХЛОРИДНЫХ РАСПЛАВАХ

Токарев О.В.[1], Волкович В.А.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: olegtokarev1999@gmail.com

ANODIC DISSOLUTION OF GALLIUM IN CHLORIDE MELTS

Tokarev O.V.[1], Volkovich V.A.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Coulometry was employed for studying electrochemical behaviour of gallium in NaCl–KCl–CsCl eutectic based melts at 550–750 oC. Formal standard electrode potentials of gallium were determined.

Методы жидкостной экстракции в технологиях переработки отработавшего ядерного топлива (ОЯТ) постепенно сдают позиции неводным пирохимическим методам, таким как метод разделения компонентов ОЯТ путем фракционирования в системе «солевой расплав – жидкий металл (сплав)». В качестве солевых электролитов наибольшее внимание уделяется хлоридным расплавам. Процессы распределения компонентов в данных системах имеют электрохимическую природу. Поэтому изучение электрохимического поведения всех элементов системы является основополагающим аспектом в разработке технологий в данной области. Особое внимание требуют предполагаемые материалы для электрода, будь то металл или сплав. К одним из таких предпочтительных в качестве материала электрода металлов относится галлий. Сложность изучения его электрохимического поведения в хлоридных расплавленных электролитах заключается в том, что в равновесии с металлом в расплаве одновременно присутствуют ионы галлия двух степеней окисления. При этом в системе возможно протекание одновременно трех окислительно-восстановительных процессов: Ga/Ga^{+}, Ga/Ga^{3+}, Ga^{+}/Ga^{3+}[1]. Целью данной работы являлось исследование процессов анодного растворения галлия и определение соотношения различных валентных форм галлия, присутствующих в расплаве. В качестве расплавленного хлоридного электролита была выбрана эвтектическая смесь 6NaCl–9KCl–5CsCl, как представляющая интерес для практического использования в пирохимических технологиях переработки ОЯТ [2].

В настоящей работе было проведено экспериментальное исследование анодного растворения галлия с использованием метода кулонометрии. Измерения проводили при различной плотности анодного тока в температурном интервале 550–750 ºС.

В результате работы по экспериментально полученным зависимостям количества растворенного на аноде металла и количества пропущенного через систему электричества были рассчитаны соотношения ионов Ga различных степеней окисления, перешедшие в электролит и оценено влияние температуры и плотности тока на преимущественное образование тех или иных валентных форм галлия.

1. Oleg V. Tokarev, Vladimir A. Volkovich, Alexander A. Ryzhov, Dmitry S. Maltsev, Electrode Potentials of Gallium in Fused Alkali Chlorides, ECS Transactions, 109 (14) 197-204 (2022)
2. V. A. Volkovich, D. S. Maltsev, E. V. Raguzina, A. S. Dedyukhin, A. V. Shchetinskiy, , L. F. Yamshchikov, A. V. Chukin, “Thermodynamics of rare earth elements and uranium in gallium based quaternary metallic alloys”, J. Alloys Comp., 2019, vol. 787, 367–378.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНОЕ КОНЦЕНТРИРОВАНИЕ Pb-210 ИЗ ВОДНЫХ ПРОБ БОЛЬШОГО ОБЪЁМА В МЕТОДИКЕ АНАЛИЗА РАЗЛИЧНЫМИ СПОСОБАМИ

Топоркова В. Д.[1], Семенищев В.С.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина
E-mail: vasilisa.toporkova@mail.ru

PRECONCENTRATION OF Pb-210 FROM LARGE AQUEOUS SAMPLES BY VARIOUS METHODS FOR RADIOANALYTICAL APPLICATIONS

Toporkova V. D.[1], Semenishchev V.S.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The work describes preconcentration of Pb-210 from large aqueous samples in radioanalytical applications using sorption in column conditions and co-precipitation with iron (III) hydroxide.

В соответствии с требованиями ОСПОРБ-99/2010 Pb-210 из-за крайне высокой радиотоксичности входит в перечень приоритетных радионуклидов, подлежащих определению в питьевых водах при превышении суммарной альфа-бета-активности. В ряде европейских стран контроль содержания Pb-210 в природных питьевых водах является обязательным. Трудность анализа Pb-210 в случае низких содержаний обусловлена его ядерно-физическими характеристиками: Pb-210 – низкоэнергетический бета-излучатель, имеющий гамма-линию с низкой энергией (47 кэВ, сильно поглощается материалом пробы и имеет низкую эффективность регистрации). Уровень вмешательства для него составляет всего лишь 0,2 Бк/л. Для достижения требуемой чувствительности анализа необходимо брать большой объем пробы (1 – 10 л), что приводит к необходимости предварительного концентрирования свинца из водной пробы.

В работе была изучена возможность концентрирования свинца из пробы воды объемом 1 – 10 л сорбционным и осадительным способами. Для сорбционных экспериментов использовали натуральную родниковую воду с добавкой 125 мкг/л свинца, 1 литр которой пропускали через колонку с сильнокислотными сульфокатионитами КУ-2 и Dowex Marathon со скоростью 1 л/ч. Отбирали порции выходного раствора по 200 мл и определяли концентрации свинца на масс-спектрометре. Результаты сорбционных экспериментов показали, что сорбенты КУ-2 и Dowex Marathon обеспечивают сходные результаты: степень сорбции свинца для 1 г сорбентов составила 87% и 88% соответственно. Увеличение массы КУ-2 до 2 г обеспечило извлечение 95,3% свинца. Таким

образом, данные сорбенты являются перспективными для предварительного концентрирования Pb-210 из пресных вод.

Также были проведены эксперименты по соосаждению свинца-210 с гидроксидом железа (III). В экспериментах использовали 10 л родниковой воды, меченную радиоактивным изотопом Pb-210, полученным из изотопного генератора. Результаты показали перспективность данного метода для неселективного выделения свинца из проб воды большого объема.

Работа поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (в рамках базовой части госзадания, проект № FEUZ-2023-0013.

МЕТОДИКА ОПРЕДЕЛЕНИЯ СОДЕРЖАНИЯ ОСНОВНЫХ И ПРИМЕСНЫХ КОМПОНЕНТОВ В СПЛАВАХ ФЕРРОВАНАДИЯ МЕТОДОМ РЕНТГЕНОФЛУОРЕСЦЕНТНОЙ СПЕКТРОМЕТРИИ

Трубачева Е.М.[1], Абрамов А.В.[1], Ребрин О.И.[1], Жиляков А.Ю.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: trubacheva01@list.ru

TECHNIQUE FOR DETERMINATION OF THE MAIN ELEMENTS AND IMPURITIES IN FERROVANADIUM ALLOYS BY X-RAY FLUORESCENCE ANALYSIS

Trubacheva E.M.[1], Abramov A.V.[1], Rebrin O.I.[1], Zhilyakov A.Y.[1]
[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia

The technique for determining the content of the main and impurity components in ferrovanadium was developed, considering particle size distribution of samples. The obtained technique is rapid and can be used for the intermediate control of ferrovanadium ingots.

Ферросплавное производство является важной частью современной черной металлургии [1]. Одним из производителей в России ферросплавов, в том числе феррованадия, является АО «УРАЛРЕДМЕТ», где в качестве сырья при его производстве используются как чистые оксиды ванадия, так и различные ванадийсодержащие концентраты, в которых могут содержаться примеси, существенно превышающие допустимые значения. Использующиеся на сегодняшний день методы анализа ферросплавов (по ГОСТ 27130-94) [2] являются длительными по времени, затратными по расходу реагентов, трудоемкими и не являются универсальными и эффективными для оперативного промежуточного контроля выплавляемых слитков. Поэтому для решения поставленной задачи разработана методика определения содержания основных и примесных компонентов в феррованадии методом рентгенофлуоресцентного анализа (РФА).

В результате проделанной работы была разработана методика определения содержания основных и примесных элементов в пробах феррованадия. Определена зависимость аналитического сигнала от гранулометрического состава проб. Выбраны условия возбуждения и регистрации для каждого аналита сплава. Проведена оценка метрологических показателей.

Полученные данные позволяют сделать расширенную методику определения содержания элементов в слитках феррованадия методом РФА.

1. Технология ванадийсодержащих ферросплавов / В. П. Зайко, В. И. Жучков, Л. И. Леонтьев. – Москва: Академкнига, 2004. – 515 с. – ISBN 5-94628-107-0.
2. ГОСТ 27130-94 - Феррованадий. Технические требования и условия поставки

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ КИСЛОРОДА СУЛЬФАТА МЕТОДОМ ВОССТАНОВИТЕЛЬНОГО ПЛАВЛЕНИЯ

Тюфякова Д.С.[1], Данилов Д.А.[1], Ившина А.А.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: tyufyakova02@mail.ru

DETERMINATION OF OXYGEN SULFATE CONTENT BY THE CARRIER GAS HOT EXTRACTION

Tyufyakova D.S.[1], Danilov D.A.[1], Ivshina A.A.[1]
[1)] Urals Federal University named after the first President of Russia B.N.Yeltsin, Yekaterinburg, Russia

Oxygen at low concentrations in the LiF-NaF-KF system can form different anions. Sulfate's oxygen ion was analyzed by the carrier gas hot extraction.

Жидкосолевой реактор (ЖСР) – ядерный реактор, в котором солевой расплав служит тепловыделяющим элементом и теплоносителем. Одно из главных достоинств жидкосолевых реакторов – их безопасность. Поэтому, в настоящее время, создание и изучение ЖСР наиболее актуально. Основой для ЖСР может служить смесь солей LiF и BeF_2 (FLiBe) или LiF, NaF и KF (FLiNaK).

Фториды лития, натрия и калия (FLiNaK) – эвтектическая смесь, имеющая достаточно низкую температуру плавления 454°C. Актуальной задачей является как получение соли FLiNaK с низким содержанием кислорода, так и подтверждение этого аналитическими методами. В последнее время, одним из основных методов определения кислорода в таких системах является метод восстановительного плавления. При высоких содержаниях кислорода в замороженных плавах кислород образует соединения с одним из матричных компонентов, например Li_2O. Однако при достижении низких концентраций, соизмеримых с другими примесными неметаллами в системе, кислород может образовывать различные анионы, например SO_4^{2-}, PO_4^{3-}, NO_3^- [1]. Поведение кислорода в таких соединениях в методе восстановительного плавления практически не исследовалось.

Определение кислорода производилось методом восстановительного плавления в токе газа-носителя. Данный метод основан на выделении кислорода из пробы и его взаимодействии при высоких температурах с углеродом тигля с образованием монооксида углерода (CO), который детектируется с помощью инфракрасного датчика. Для измерения содержания кислорода была использована система определения газообразующих примесей HORIBA EMGA-620W/C. Анализ проводился в графитовых капсулах, в качестве газа-носителя был использован аргон.

В предварительно дегазированные графитовые капсулы было помещено по 50 мкл водного раствора с известным содержанием сульфат иона, так чтобы содержание сульфатного кислорода попадало в диапазон от 0.03 до 0.4 мг. Далее капсулы сушились при 90°C в течение 1 часа и отправлялись на анализ. Была получена зависимость «введено-найдено», свидетельствующая о количественной конверсии кислорода в CO.

Особое внимание было уделено процедуре измерения сигнала холостого опыта. Для этого исследовалось поглощение графитовой капсулой кислорода воздуха при различных температурах (30°C,70°C,90°C) и временных выдержках.

1. Guoqiang Zong, Zhi-Bing Zhang, Jia-Hong Sun, Ji-Chang Xiao, Preparation of highpurity molten FLiNaK salt by the hydrofluorination process, Journal of Fluorine Chemistry, (2017).

ОПРЕДЕЛЕНИЕ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ В СМОЛЕ PUROLITE C160 С ПОМОЩЬЮ РЕНТГЕНОФЛУОРЕСЦЕНТНОГО АНАЛИЗА

Уланова О.Д.[1], Попова А.А.[1], Абрамов А.В.[1], Буньков Г.М.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: olesyaula@gmail.com

DETERMINATION OF RARE EARTH ELEMENTS IN PUROLITE C160 RESIN BY WD-XRF

Ulanova O.D.[1], Popova A.A.[1], Abramov A.V.[1], Bunkov G.M.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Rare earth elements in resin Purolite C160 were determined by X-ray fluorescence method. Sample preparation was carried out by pressing crushed resin into a pressed sample on a boric acid substrate. The metrological characteristics of the analysis technique were also evaluated.

Редкоземельные элементы (РЗЭ) применяют в различных отраслях современной техники, химической и стекольной промышленности, производстве взрывчатых веществ [1]. Особо эффективным методом добычи РЗЭ является сорбирование элементов из растворов подземного выщелачивания урана. Крайне важно знать содержание РЗЭ в смоле для оценки эффективности ее функционирования. Установление данного содержания достаточно сложная задача, которая может быть решена прямым анализом смолы методом рентгенофлуоресцентной спектрометрии. Это быстрый, высокоточный метод, позволяющий эффективно определять элементы с высоким атомным номером в лёгкой матрице. Альтернативных вариантов прямого определения содержания РЗЭ на органической матрице не существует.

Разработана методика определения содержания РЗЭ в смоле Purolite C160. Создана методика пробоподготовки смолы методом прессования. Сорбент в индивидуальном виде обладает физическими свойствами, при которых частицы смолы отталкиваются друг от друга, в результате проба не формуется. Однако такие процедуры как: предварительная сушка и тонкое измельчение, позволяют запрессовать смолу на подложке из борной кислоты.

Количественный элементный анализ требует наличия образцов сравнения (ОС). ОС синтезированы из чистого сорбента путём сорбции РЗЭ на смолу из раствора с установленным содержанием аналитов с последующим прессованием пробы по ранее разработанной методике. Состав растворов перед сорбцией и после определен с помощью масс-спектрометрии с индуктивно-связанной

плазмой, методом вычитания установлено содержание РЗЭ в смоле – образце сравнения.

Методика разрабатывалась с использованием волнодисперсионного спектрометра «ARL ADVANT'X 4200W». Подобраны оптимальные условия регистрации сигнала, произведен учет матричных влияний. Произведена оценка метрологических характеристик разработанной методики. Оценена неоднородность и погрешность приготовленных ОС. Установлены точности определения содержаний РЗЭ разработанной методикой.

1. Редкоземельные металлы / Михайличенко А.И., Михлин Е.Б., Патрикеев Ю.Б. – М.: Металлургия, 1987. – 232 с.

ЭЛЕКТРООСАЖДЕННЫЕ ПОЛИМЕРЫ С МОЛЕКУЛЯРНЫМИ ОТПЕЧАТКАМИ ХЛОРАМФЕНИКОЛА НА ОСНОВЕ ПЕНТАФТОРФЕНИЛ-2Н-ИМИДАЗОЛ ПРОИЗВОДНЫХ КАРБАЗОЛА: ПОЛУЧЕНИЕ И СВОЙСТВА

Ведерникова Е.Д.[1], Зайдуллина Р.А.[1], Свалова Т.С.[1], Мосеев Т.Д.[1], Вараксин М.В.[1], Козицина А.Н.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
E-mail: liza.vedernikova-09@mail.ru

PENTAFLUOROPHENYL-2H-IMIDAZOLE DERIVATIVES OF CARBAZOLE BASED MOLECULARLY IMPRINTED POLYMER FOR CHLORAMPHENICOL DETECTION: CREATION AND PROPERTIES

Vedernikova E.D.[1], Zaidullina R.A.[1], Svalova T.S.[1], Moseev T.D.[1], Varaksin M.V.[1], Kozitsina A.N.[1]
[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia

In this work the creation and characterization of molecularly imprinted polymer based on pentafluorophenyl-2H-imidazole derivatives of carbazole for chloramphenicol detection have been investigated. The increased direct electrochemical response of chloramphenicol on modified electrodes was shown.

Ввиду широкого применения в ветеринарии и медицине, селективное количественное определение хлорамфеникола (ХА) в объектах окружающей среды и продуктов питания является актуальной задачей современной аналитической химии и требует разработки новых подходов и портативных сенсорных устройств. Ключевую роль в обеспечении требуемых аналитических характеристик играет природа и структура рецепторного слоя сенсора. Замена традиционно используемых биорецепторов синтетическими аналогами позволит снизить стоимость и увеличить стабильность сенсорных устройств, а групповой и индивидуальной селективности определения возможно достичь посредством применения полимеров с молекулярными отпечатками (ПМО). Так, например, по результатам ранее проведенных исследований 1,3-/1,4-диазиновые производные карбазола продемонстрировали высокое сродство к нитробензолу, и был получен рецепторный слой на их основе [1].

Целью данной работы являлось получение и исследование электропроводящих полимерных слоев на основе 9-(4'-(2,2-диметил-5-(пентафторфенил)-2Н-имидазол-4-ил)-[1,1'-бифенил-4-ил)-9Н-карбазола с полимерными отпечатками хлорамфеникола на поверхности стеклоуглеродного электрода (СУЭ).

Выбор соединения осуществлен на основании результатов ранее проведенных исследований и обусловлен наибольшей комплементарностью к аналиту (K_{sv}=216 800 M^{-1}). Предлагаемая схема и условия электроосаждения приведены на рисунке 1.

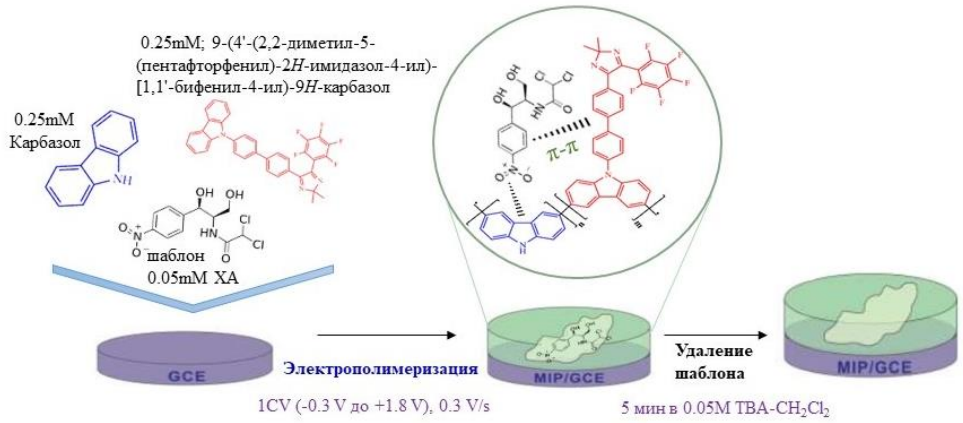


Рис. 1. Схема получения полимера с молекулярным отпечатком ХА посредством электроосаждения 9-(4'-(2,2-диметил-5-(пентафторфенил)-2Н-имидазол-4-ил)-[1,1'-бифенил-4-ил)-9Н-карбазола.

Оценка электропроводности полимерного слоя осуществлялась посредством регистрации циклических вольтамперограмм в системе $[Fe(CN)_6]^{4-/3-}$. В ходе проведенных исследований в выбранных рабочих условиях установлено, что в результате электроосаждения функциональной молекулы наблюдалось снижение электропроводности электрода на 44% относительно немодифицированного СУЭ, в то время как введение 9Н-карбазола в качестве сополимера, напротив, способствовало увеличению токов более чем на 10%. Было показано увеличение прямого электрохимического отклика хлорамфеникола на модифицированных электродах, получены и охарактеризованы полимеры с молекулярными отпечатками.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ № 20-73-10077

1. Svalova T.S. et al. “Rapid and sensitive determination of nitrobenzene in solutions and commercial honey samples using a screen-printed electrode modified by 1,3-/1,4-diazines.” Food chemistry vol. 372 (2022)

ЭЛЕКТРОДНЫЕ ПОТЕНЦИАЛЫ ЦИРКОНИЯ В ЖИДКОМЕТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ С ГАЛЛИЕМ И СПЛАВАМИ НА ЕГО ОСНОВЕ

Яковлев А.В.[1], Новикова М.Н.[1], Волкович В.А.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: yakoblev121299@gmail.com

ELECTRODE POTENTIALS OF ZIRCONIUM IN LIQUID METAL SYSTEMS WITH GALLIUM AND GALLIUM-BASED ALLOYS

Yakovlev A.V.[1], Novikova M.N.[1], Volkovich V.A.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Electrode potentials of zirconium in Zr–Ga, Zr–Ga–In and Zr–Ga–Zn alloys were measured in LiCl–KCl–CsCl based melts containing added K_2ZrF_6. The measurements were performed at 300–850 ºC.

Неводные методы переработки отработавшего ядерного топлива (ОЯТ) рассматриваются в качестве основы для реализации короткозамкнутого ядерного топливного цикла реакторов на быстрых нейтронах. Наибольший интерес представляют пироэлектрохимические методы, реализуемые в среде солевых расплавов. Разделение компонентов ОЯТ осуществляется в таких технологиях осуществляется за счёт различных электрохимических свойств, которые зависят от состава электролита и природы материала электрода. Электродные потенциалы урана и циркония в хлоридных расплавах близки, что затрудняет глубокую очистку урана от этого продукта деления.

Одним из возможных способов разделения урана и циркония являются электрохимические процессы на активных жидкометаллических электродах. Галлий и сплавы на основе галлия являются перспективными для разделения урана и редкоземельных металлов. Поэтому представляло интерес проверить перспективность использования жидкометаллических систем на основе галлия для глубокого разделения урана и циркония. Целью настоящей работы поэтому являлось определение электродных потенциалов циркония в сплавах с галлием и смесями на его основе. Эксперименты выполняли при температурах от 300 до 850 ºС с использованием метода измерения электродвижущих сил следующих гальванических элементов:

РЭ | (LiCl–KCl–CsCl)–$ZrCl_4$ ‖ (LiCl–KCl–CsCl)–AgCl | Ag

РЭ | (LiCl–KCl–CsCl)–K_2ZrF_6 ‖ (LiCl–KCl–CsCl)–AgCl | Ag

В качестве рабочих электродов (РЭ) использовали смеси циркония с галлием с эвтектическими сплавами галлия с индием и цинком: Zr–Ga, Zr–$(Ga–In)_{эвт.}$ и Zr–$(Ga–Zn)_{эвт.}$ Содержание циркония в сплавах составляло 7–10 мас. %, что

превышает растворимость циркония в галлии во всём рабочем диапазоне температур. Электродом сравнения служила серебряная проволока, погруженная в расплав эвтектической смеси LiCl–KCl–CsCl с добавкой 1 мол. % хлорида серебра.

Пример температурной зависимости электродных потенциалов циркония в сплавах Zr–Ga, измеренных в расплавах (LiCl–KCl–CsCl)–K_2ZrF_6 представлен на рисунке 1. Видно, что изменение концентрации циркония в галлиевом сплаве с 6 до 9 мас. % не оказывает влияния на величину электродного потенциала. Это указывает на то, что во всех сплавах в равновесии с жидкой фазой присутствовало одно и то же интерметаллическое соединение. Также видно, что с повышением температуры электродный потенциал сплава закономерно смещается в область положительных значений, от –1,7 до –1,3 В.

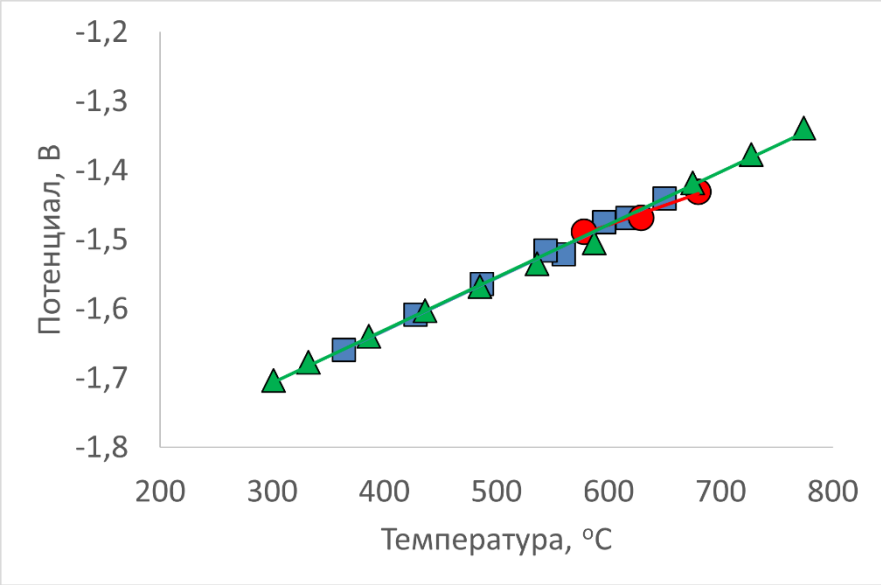


Рис.1. Электродные потенциалы Zr в расплавах (LiCl–KCl–CsCl)–K_2ZrF_6 (потенциалы приведены относительно Ag^+/Ag. Содержание Zr в сплаве Zr–Ga, мас. %: 6,36 (квадраты); содержание Zr в сплаве Zr-$(Ga\text{-}In)_{эвт.}$, мас. %: 6,83 (круги); содержание Zr в сплаве Zr–$(Ga–Zn)_{эвт.}$, мас. %: 9,25 (треугольники).

Используя полученные ранее данные об электродных потенциалах циркония в исследованных солевых расплавах появляется возможность для определения термодинамических характеристик интерметаллических соединений циркония, образующихся в сплавах с галлием и смесями Ga–In и Ga–Zn.

МЕТОД ОЧИСТКИ ВОДЫ ОТ ИОНОВ ЖЕЛЕЗА (II) С ПОМОЩЬЮ ВИБРОАКУСТИЧЕСКОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ

Журавлева М.О.[1], Богатов Н.А.[1, 2], Савина А.С.[1, 2], Пентюхин Е.И.[1, 2], Зоткин А.П.[1, 2]
[1)] ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»
[2)] Инжиниринговый центр «Автоматика и робототехника» МГТУ им. Н.Э. Баумана
E-mail: zhuravleva.rita2235@yandex.ru

WATER PURIFICATION METHOD FROM IRON (II) IONS BY VIBROACOUSTIC ACTION MEANS

Zhuravleva M.O.[1], Bogatov N.A.[1, 2], Savina A.S.[1, 2], Pentyukhin E.I.[1, 2], Zotkin A.P.[1, 2]
[1)] D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia
[2)] Engineering Center "Automation and Robotics" Bauman Moscow State Technical University

The paper considers the process of water purification from iron (II) ions by means of their oxidation using low-frequency vibroacoustic effects, as well as a comparison of this method with bubbling.

Вода занимает особое место среди всех ресурсов планеты. По данным ВОЗ, более 1.2 миллиарда человек не имеют доступа к чистой воде [1]. В 2015 году на повестку дня были приняты 17 целей в области устойчивого развития. Две цели непосредственно относятся к водным ресурсам. Другие же – опосредованно [2]. Одним из факторов, которые вынуждают прибегать к водоочистке, является наличие в воде загрязняющих элементов (железо, марганец, тяжелые металлы).

Длительное употребление воды, содержащей железо, по количеству превышающее нормы СанПиН может приводить к болезням пищеварительной системы, почек и печени, а также кожных покровов [3]. Размножение железобактерий приводит к наростам и отложениям в металлических трубопроводах, что приводит к выходу из строя систем водоснабжения.

На данный момент известны несколько методов очистки воды от железа, такие как мембранные методы, биологические методы, методы ионного обмена. Недостатками этих методов являются высокая себестоимость, сложность реализации, утилизация побочных продуктов.

Известна работа [4], показывающая принципиальную возможность окисления ионов двухвалентного железа в поле виброакустического воздействия. Основываясь на предположении о том, что под виброакустическим воздействием происходит насыщение среды воздухом можно допустить, что кислород, попадающий из воздуха, интенсифицирует процесс окисления ионов двухвалентого железа, аналогично процессам, происходящим при барботаже

воздуха. Представленные на рисунке 1 данные наглядно отражают уменьшение количества ионов Fe (II) под воздействием виброакустических колебаний в сравнении с аэрацией и контрольным образцом.

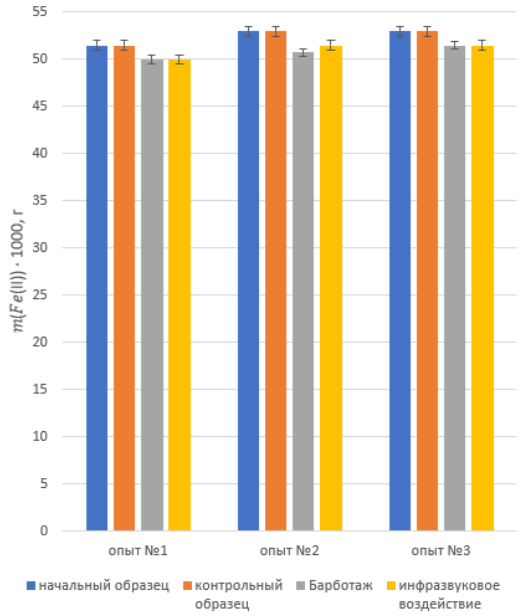


Рис. 1. Масса Fe(II) в образцах после проведения эксперимента

Исходя из всего вышесказанного, возможно формирование нового способа очистки воды от солей двухвалентного железа. Способ не уступает по очищающей способности барботажу, но, в свою очередь, является энергоресурсосберегающим, а также в перспективе может оказаться более экономически выгодным.

1. Карманова А.А. Глобальная водная проблема // Международный журнал прикладных наук и технологий «Integral». - 2021. - №1. - С. 64-70.
2. Преобразование нашего мира: Повестка дня в области устойчивого развития на период до 2030 года. Резолюция Генеральной Ассамблеей от 25 сентября 2015 года. A/Res/70/1.
3. Аверина Ю.М., Курбатов А.Ю., Джессу Лубо Ивон Седрик, Ветрова М.А. Гидродинамическая обработка природной воды // Успехи в химии и химической технологии. - 2018. - №1. - С. 43-45.
4. Савина А.С., Пентюхин Е.И., Богатов Н.А., Зоткин А.П., Тихонравов А.А., Болдырев В.С. Окисление железа(II) в поле низкочастотных виброакустических воздействий // Успехи в химии и химической технологии. - М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2022. - С. 144-147.

СЕКЦИЯ 5

МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ

СИНТЕЗ, СТРУКТУРА И ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА НОВЫХ BA- И SR-ЗАМЕЩЕННЫХ СЛОИСТЫХ ПЕРОВСКИТОВ НА ОСНОВЕ $BaNd_2In_2O_7$

Абакумова Е.В.[1, 2], Бедарькова А.О.[1, 2], Тарасова Н.А.[1, 2], Анимица И.Е.[1, 2]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: abakumova.ekaterina98@gmail.com

SYNTHESIS, STRUCTURE AND TRANSPORT PROPERTIES OF NEW Ba- AND Sr-SUBSTITUTED LAYERED PEROVSKITES BASED ON $BaNd_2In_2O_7$

Abakumova E.V.[1, 2], Bedarkova A.O.[1, 2], Tarasova N.A.[1, 2], Animitsa I.E.[1, 2]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia
[2)] Institute of High Temperature Electrochemistry, Yekaterinburg, Russia

In this work, we synthesized samples based on $BaNd_2In_2O_7$. The samples $BaNd_{1.9}M_{0.1}In_2O_{6.95}$ (M= Sr, Ba) have the block-layered structure. The transport properties of the sample were measured by varying the external parameters of the environment T, pH_2O, and pO_2.

В современном мире все человечество изо дня в день сталкивается с потребностью в электричестве: от подзарядки мобильных телефонов до бесперебойной работы различного оборудования на предприятиях и в бытовом обиходе. Сегодня из известных источников электрического тока наиболее популярны такие как АЭС, ТЭС, ГЭС и солнечные батареи. Как известно, получение электричества от этих источников осложнено рядом проблем: трудности переработки и утилизации РАО (АЭС), исчерпаемость топлива и выделение вредных веществ в атмосферу воздуха (ТЭС), вред флоре и фауне в самой реке и на ее берегах (ГЭС), нехваткой электроэнергии для обслуживания населения (солнечные батареи) и т.д. Исходя из изложенных суждений, очевидно, что необходим альтернативный источник электроэнергии, который будет решать эти проблемы и удовлетворять всем требованиям.

В последние годы растет интерес к водородной энергетике как к альтернативному способу получения электроэнергии. Преимущество водородной энергетики заключается в том, что получение энергии топливным элементом (ТЭ) без выделения загрязняющих веществ в атмосферу. В зависимости от типа электролиты ТЭ классифицируются на ПОЭМТЭ, ЩТЭ, ФКТЭ, РКТЭ и ТОТЭ. Наиболее перспективным среди них является ТОТЭ. ТОТЭ (твердооксидный топливный элемент) – это энергоустановка, в которой главными связующими элементами являются катод, анод и электролит, а материалом электролита в свою очередь служит твердый оксид. Одними из

перспективных кандидатов для материалов электролита ТОТЭ являются соединения со структурой слоистого перовскита. Слоистые перовскиты с двумя слоями в структуре n = 2 можно описать общей формулой $AA'_2B_2O_7$, где A - щелочноземельный металл, такой как барий или стронций, A' - редкоземельный металл, такой как лантан или неодим, B - трехвалентный металл, такой как индий.

В настоящей работе получены составы слоистых перовскитов, $BaNd_{1.9}M_{0.1}In_2O_{6.95}$ (M= Sr, Ba) путем катионного допирования матричного состава $BaNd_2In_2O_7$, исследована их структура, кислородно-ионная и протонная проводимости. Показано, что внедрение допанта (Sr, Ba) в подрешетку неодима приводит к увеличению значений проводимости на 0,3 порядка величины. Установлено, что в условиях влажного воздуха при температурах ниже 450 ºС наблюдается преобладание протонной проводимости.

СИНТЕЗ И ПОЛУЧЕНИЕ СЛОИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ КЕРАМИКИ НА ОСНОВЕ СТАННАТА БАРИЯ

Акопян М.Т.[1], Звонарева И.А.[1, 2], Старостин Г.Н.[1, 2], Медведев Д.А.[1, 2]
[1)] Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2)] Уральский федеральный университет имени первого президента России Б. Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
E-mail: akopyan.mariam@bk.ru

SYNTHESIS AND PRODUCTION OF LAYERED CERAMIC MATERIALS BASED ON BARIUM STANNATE

Akopyan M.T.[1], Zvonareva I.A.[1, 2], Starostin G.N.[1, 2], Medvedev D.A.[1, 2]
[1)] Institute of High Temperature Electrochemistry of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences Yekaterinburg, Russia
[2)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Single-phase $Ba_{2-x}La_xSnO_{4+\delta}$ samples were obtained. Their decomposition after long storage in air is observed. High levels of p and n-type electronic conductivity were determined. The materials are suitable for technical applications without contact with ambient air

Оксиды с протонной проводимостью широко изучаются в качестве перспективных электролитных материалов для низко- и среднетемпературных протонных керамических топливных элементов или электролизеров [1]. В настоящее время наиболее исследованными системами являются цераты и цирконаты бария, а также их твердые растворы. Несмотря на наивысшие достижимые уровни протонной проводимости, неудовлетворительная химическая устойчивость цератов бария и высокое зернограничное сопротивление циркоината бария препятствуют их коммерциализации [2]. Для преодоления данных ограничений могут быть использованы рациональные подходы, включая дальнейшую химическую модификацию основных оксидов или поиск новых классов протонных проводников.

В настоящей работе керамические материалы составов $Ba_{2-x}La_xSnO_{4+\delta}$ (x=0; 0.05; 0.1) были получены твердофазным методом синтеза при 1150–1200°C с 0.5 масс.% CuO в качестве спекающей добавки. Методом рентгенофазового анализа (Rigaku MiniFlex 600) было установлено, что образцы являются однофазными (рисунок 1) со структурной фазой Раддлесдена-Поппера. Методом растровой электронной микроскопии (TESCAN VEGA Compact) получены микрофотографии спеченных образцов (рисунок 2). Увеличение количества лантана в составе привело к уменьшению размера зерен керамики и увеличению пористости. После хранения на открытом воздухе в течение одного месяца зафиксировано разложение слоистых фаз на простые оксиды.

Исследования электропроводности в зависимости от парциального давления кислорода pO_2 четырехзондовым методом на постоянном токе были проведены для определения парциальных составляющих общей проводимости (σобщ) (ионной и электронной p- и n- типа). Как видно из (рисунок 3a), со снижением pO_2 общая проводимость сначала уменьшается в окислительной области, затем увеличивается в восстановительной области, что указывает на доминирующий p-тип проводимости (дырочный) при высоких уровнях pO_2 и доминирующую электропроводность n-типа (электронная) при низких уровнях pO_2 [3]. За исключением нескольких точек, соответствующих общей проводимости, измеренной на пограничных значениях pO_2, модельная зависимость соответствует экспериментальным данным (рисунок 3b). Поэтому были выбраны стабильные условия (т.е. $\log pO_2 = -16$ и $\log pO_2 = -2$, соответственно) для оценки электронной проводимости n- и p-типа. Рассчитанные значения как электронной, так и дырочной проводимости согласуются с правилом Аррениуса, указывающим на термоактивированный характер проводимости (рисунок 3c).

Таким образом, проявляя неудовлетворительную устойчивость на открытом воздухе, слоистые станнаты бария обладают достаточно хорошими электронно-транспортными характеристиками. С этой точки зрения они могут быть рассмотрены для прикладных целей, при исключении их контакта с компонентами окружающего воздуха.

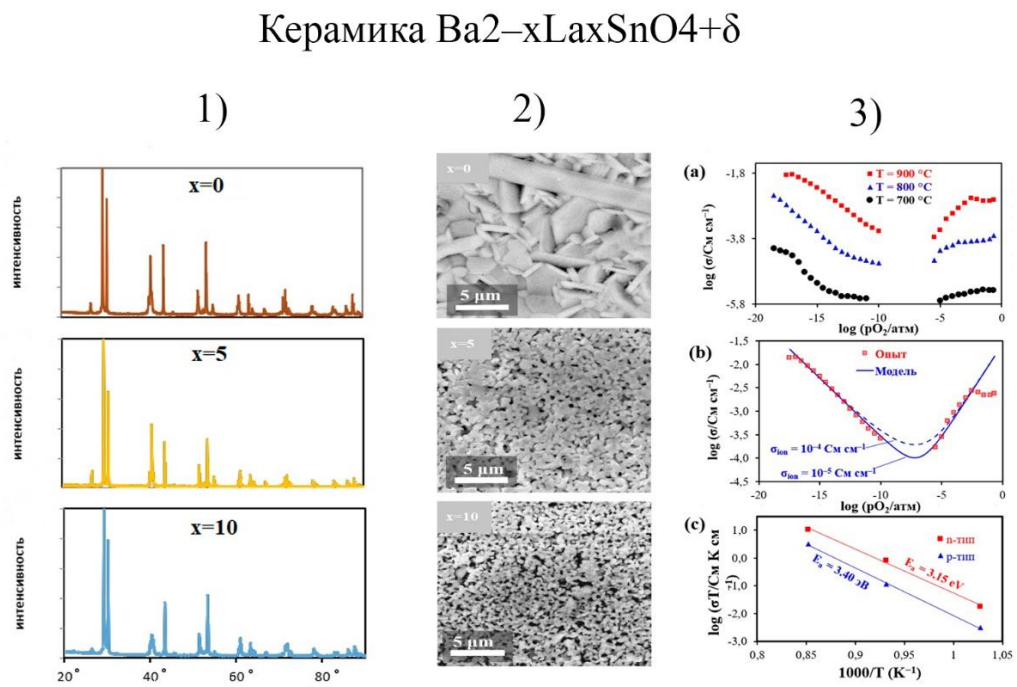


Рис. 1. 1)РФА ; 2)СЭМ-фото; 3)Транспортные свойства при x=0: зависимости σобщ от pO_2 при 700–900 °C (a); сопоставление σобщ при 900°C с модельной

зависимостью (b); зависимости σp и σn от обратной температуры при $pO_2=10^{-16}$ и 10^{-2} атм, соответственно (c).

1. A review of current performance of rare earth metal-doped barium zirconate perovskite: The promising electrode and electrolyte material for the protonic ceramic fuel cells. Sefiu Abolaji Rasaki , Changyong Liu , Changshi Lao. Progress in Solid State Chemistry, Volume 63, (September 2021)
2. Review on the preparation of electrolyte thin films based on cerate-zirconate oxides for electrochemical analysis of anode-supported proton ceramic fuel cells. M. A.N.Syafkeena , M.L. Zainor , O.H. Hassan. Journal of Alloys and Compounds, Volume 918, (15 October 2022)
3. Electrochemistry and energy conversion features of protonic ceramic cells with mixed ionic-electronic electrolytes. I. Zvonareva, Xian-Zhu Fu, D. Medvedev, Zongping Shao. Energy & Environmental Science, Issue 2, (2022)

ВЛИЯНИЕ ДЕФЕКТОВ НА СВОЙСТВА НОВОЙ ОПТИЧЕСКОЙ МАТРИЦЫ $li_9mg_3[PO_4]_4F_3$

Акулов Д.А.[1], Калинкин М.О.[1], Абашев Р.М.[2], Сюрдо А.И.[2], Медведева Н.И.[1], Келлерман Д.Г.[1]

[1)] Институт Химии Твердого Тела Уральского отделения Российской Академии Наук, г. Екатеринбург, Российская Федерация

[2)] Институт физики металлов Уральского отделения Российской Академии Наук, г. Екатеринбург, Российская Федерация

E-mail: akulych.da@gmail.com

IMPACT OF DEFECTS ON PROPERTIES OF THE NEW OPTICAL MATRIX $Li_9Mg_3[PO_4]_4F_3$

Akulov D.A.[1], Kalinkin M.O.[1], Abashev R.M.[2], Syurdo A.I.[2], Medvedeva N.I.[1], Kellerman D.G.[1]

[1)] The Institute of Solid State Chemistry of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russian Federation

[2)] The Institute of Metal Physics of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russian Federation

In this work, we study the role of defects in the formation of optical properties of a new fluorine-containing phase $Li_9Mg_3[PO_4]_4F_3$. A number of optical and functional characteristics of new thermoluminescent materials have been established, and a search has been made for ways to improve them.

Фториды и фосфаты щелочных и щелочно-земельных металлов рассматриваются в качестве оптических матриц, предназначенных для создания устройств оптической дозиметрии. Они обладают рядом различных преимуществ, например, прозрачностью в широком волновом диапазоне, химической и термической стабильностью. Нами исследовались оптические и функциональные характеристики фторфосфата состава $Li_9Mg_3[PO_4]_4F_3$. Ранее данное соединение изучалось лишь в одной работе [1], где были проведены исследования структуры и некоторых электрохимических свойств.

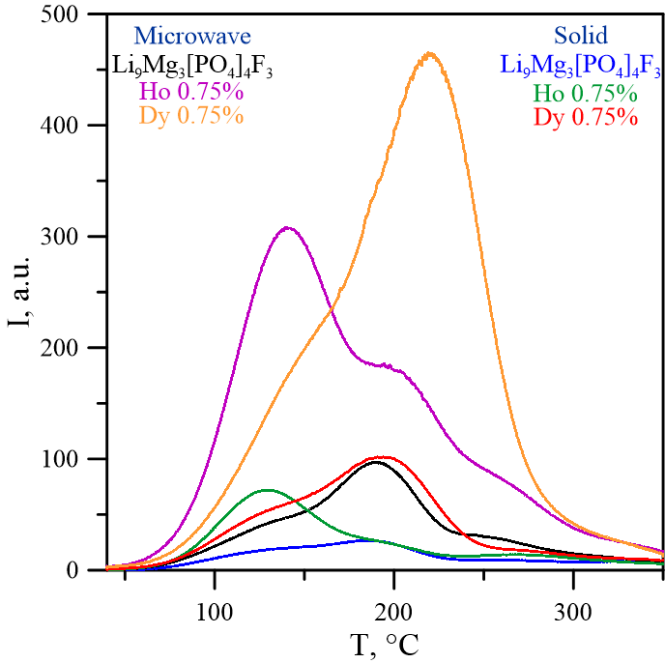


Рис. 1. Кривые термически стимулированной люминесценции для $Li_9Mg_3[PO_4]_4F_3$

Нами впервые показана перспективность $Li_9Mg_3[PO_4]_4F_3$ как материала для твердотельных дозиметров. Изучены термолюминесцентные свойства фторфосфатов, синтезированных двумя методами: твердофазным и микроволновым. Полученные результаты показали, что микроволновой метод синтеза позволяет значительно повысить интенсивность термически стимулированной люминесценции по сравнению с классическим твердофазным методом. Этот эффект наблюдается и для образцов, допированных редкоземельными элементами, и, вероятно, связан с увеличением количества заряженных дефектов, которые являются ловушками для электронов и дырок в процессе облучения. Для проверки нашего предположения получены спектры электронного парамагнитного резонанса (ЭПР). Обнаружено повышение интенсивности ЭПР-сигнала для образцов, полученных микроволновым методом, что свидетельствует о повышении количества заряженных дефектов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 20-13-00121)

1. Yahia H. B. et al. // Journal of Materials Chemistry A. – 2014. – V. 2, № 16. – P. 5858-5869.

ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА АНИОН-ДЕФИЦИТНЫХ ГЕКСАГОНАЛЬНЫХ ПЕРОВСКИТОВ $Ba_5In_2Al_2ZrO_{13}$ И $Ba_7In_6Al_2O_{19}$

Андреев Р.Д.[1, 2], Анимица И.Е.[1, 2]
[1)] Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия
[2)] Институт высокотемпературный электрохимии УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: andreev.roman@urfu.ru

ELECTRIC CONDUCTIVITY OF ANION-DEFICIENT HEXAGONAL PEROVSKITES $Ba_5In_2Al_2ZrO_{13}$ AND $Ba_7In_6Al_2O_{19}$

Andreev R.D.[1, 2], Animitsa I.E.[1, 2]
[1)] Ural federal university, Yekaterinburg, Russia
[2)] Institute of high temperature electrochemistry UB RAS, Yekaterinburg, Russia

The goal of the work is investigation of physico-chemical properties of the oxygen-deficient complex oxides $Ba_5In_2Al_2ZrO_{13}$ и $Ba_7In_6Al_2O_{19}$. The compositions were obtained through the solid-state route. Structure, hydration processes and transport properties were investigated.

Оксиды со структурой перовскита в последнее время вызывают серьёзный научный интерес ввиду широких возможностей их применения. Одной из отраслей применения является альтернативная энергетика, сложные оксиды в ней используются в качестве твёрдых электролитов топливных элементов. В зависимости от условий оксидные материалы способны проявлять кислород-ионную и протонную проводимость. Важной задачей такой быстроразвивающейся отрасли альтернативой энергетики как водородная энергетика является поиск материалов с высокими значениями протонной проводимости в среднетемпературном интервале (400−700 °C). Установлено, что среднетемпературные электрохимические источники энергии являются наиболее рентабельными по сравнению с высокотемпературными аналогами [1]. Недавно возможность протонного транспорта была обнаружена в сложных структурах - анион-дефицитных гексагональных перовскитоподобных оксидах, которые могут быть охарактеризованы, как структуры когерентного срастания различных структурных блоков [2].

Целью настоящей работы является физико-химическое исследование гексагональных перовскитоподобных оксидов $Ba_5In_2Al_2ZrO_{13}$ и $Ba_7In_6Al_2O_{19}$. Возможность проявления соединениями протонной проводимости, а также потенциально высокие значения протонной проводимости позволяют рассматривать исследуемые соединения в качестве перспективных материалов для протонообменных мембран в водородных топливных элементах.

В данной работе методом твердофазного синтеза были получены соединения состава $Ba_5In_2Al_2ZrO_{13}$ и $Ba_7In_6Al_2O_{19}$, была проведена их рентгенофазовая

аттестация. Установлено, что соединения характеризуются гексагональной сингонией и описываются пространственной группой P_{63}/mmc. Кристаллическая структура $Ba_5In_2Al_2ZrO_{13}$ представляет собой структуру срастания перовскитного блока $BaZrO_3$ и двух кислород-дефицитных блоков Ba_2InAlO_5 [3]. Структуру соединения $Ba_7In_6Al_2O_{19}$ также можно охарактеризовать как структуру срастания с кислород-дефицитным блоком Ba_2InAlO_5. Вторым блоком, образующим структуру, является $Ba_3In_4O_9$. Структуру $Ba_3In_4O_9$ можно представить как производную перовскита ABO_3, содержащую вакансии в подрешётке Ba и O. Таким образом, $Ba_7In_6Al_2O_{19}$ содержит катионные и анионные вакансии.

Методом термогравиметрического анализа и ИК-спектроскопии были исследованы процессы гидратации соединений. Было установлено, что исследуемые соединения способны к обратимому диссоциативному поглощению паров воды из газовой фазы, а единственной формой существования протонов в структурах является OH^--группа. Транспортные свойства соединений исследовались в широком диапазоне температур при различных значениях парциальных давлений кислорода и паров воды. Было установлено, что исследуемые соединения на воздухе являются смешанными кислород-ионными проводниками, а также способны проявлять протонную проводимость в атмосферах с высоким содержанием паров воды. Был произведён расчёт парциальных проводимостей и чисел переноса.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ № 22-23-20003

1. Meng Y., Gao J., Zhao Z., Amoroso J., Tong J., Brinkman K.S., J. Mater. Sci., 54, 9291–9312, (2019)
2. Murakami T., Hester J., Yashima M., J. Am. Chem. Soc., 142, 11653–11657, (2020)
3. Shpanchenko R., Abakumov A., Antipov E., Kovba L., Alloy. Compd., 206, 185–188, (1994)

АГРЕГАТИВНАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ ГИДРОЗОЛЯ h-BN В ПРИСУТСТВИИ NaCl

Барилюк Д. В.[1], Конопацкий А. С.[1], Калинина В. В.[1], Штанский Д. В.[1]
[1)] Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС», г. Москва, Россия
E-mail: danybary@mail.ru

AGGREGATIVE STABILITY OF h-BN HYDROSOL IN THE PRESENCE OF NaCl

Barilyuk D.V.[1], Konopatsky A.S.[1], Kalinina V. V.[1], Shtansky D.V.[1]
[1)] National university of Science and Technology «MISIS», Moscow, Russia

The aggregative stability of h-BN hydrosol in the presence of NaCl solution was studied by DLS and turbidimetry. NaCl was demonstrated to be indifferent with respect to hydrosol particles.The threshold concentration of NaCl below which h-BN hydrosol remain relatively stable was determined.

Гексагональный нитрид бора (h-BN) является биосовместимым материалом, что делает его перспективным для применения в медицине, например для направленной доставки лекарств [1]. Обычно используются наночастицы h-BN, диспергированные в воде. Однако, организм человека содержит соли, например NaCl, которые могут стимулировать агрегацию наночастиц, что может быть сдерживающим фактором для лекарственной терапии. Таким образом, для эффективного и безопасного использования гидрозолей h BN требуется исследование их агрегативной устойчивости в присутствии электролитов. Целью данной работы являлось изучение агрегативной устойчивости гидрозоля h-BN в присутствии NaCl.

Агрегативно и седиментационно устойчивый 0.01% гидрозоль h-BN был приготовлен из его водной дисперсии с концентрацией 0.02%. Для этого 1 г коммерческого порошка h-BN (Плазмотерм) с размером наночастиц 70 нм эксфолиировали в воде с помощью ультразвукового гомогенизатора (Bandelin SONOPLUS HD 2200). Полученный порошок h BN высушивали, а затем повторно диспергировали в воде. Полученную 0.02% дисперсию разбавляли равным объемом воды или электролита. Влияние концентрации NaCl на значения ζ-потенциала наночастиц h-BN изучали на приборе Malvern Zetasizer Nano ZS. Влияние концентрации NaCl на агрегативную устойчивость гидрозоля h-BN изучали методом турбидиметрии на спектрофотометре Shimadzu mini-1240 при длине волны 800 нм.

Результаты исследований приведены на рисунке 1.

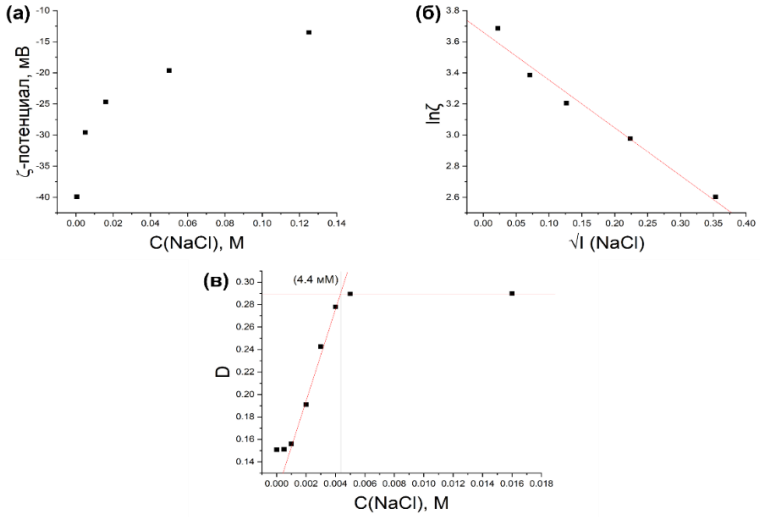


Рис. 1. Зависимость ζ-потенциала h-BN от концентрации NaCl (а), зависимость ln ζ от √I в присутствии NaCl (б) и график зависимости оптической плотности гидрозоля h-BN от концентрации NaCl (в).

На рисунке 1а представлена зависимость ζ-потенциала h-BN от концентрации NaCl. Полученные данные свидетельствует о том, что добавление NaCl сильно снижает ζ потенциал частиц гидрозоля h-BN. Чтобы определить к какому типу электролитов (индифферентному или неиндифферентному) относится NaCl по отношению к h-BN была построена зависимость в координатах ln ζ - √I (квадратный корень из ионной силы раствора электролита) (рис. 1б). Из литературных данных известно, что если используемый электролит является индифферентным, то экспериментальные данные о влиянии его добавок на ζ потенциал будут описываться линейной зависимостью в координатах ln ζ - √I, что и подтверждают полученные результаты. Это говорит о том, что главную роль в снижении ζ-потенциала играет сжатие диффузной части двойного электрического слоя. Как видно из рисунка 1в, начиная с концентрации 4.4 мМ и выше, оптическая плотность системы перестает расти, то есть гидрозоль h BN является относительно стабильным до достижения данной концентрации.

Таким образом, NaCl является индифферентным по отношению к частицам гидрозоля h-BN, а вплоть до концентрации NaCl 4.4 мМ гидрозоль h-BN остается относительно стабильным. Молярная концентрация NaCl в крови составляет примерно 0.15 М, следовательно вводить в организм гидрозоль h-BN без стабилизирующих добавок нежелательно.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (соглашение № 20–19–00120).

1. I.V. Sukhorukova, I.Y. Zhitnyak, A.M. Kovalskii, A.T. Matveev, O.I. Lebedev, X. Li, N.A. Gloushankova, D. Golberg, D.V. Shtansky, ACS Appl. Mater. Interfaces., 7, 17217–17225 (2015)

КАЛИБРОВКА ВОЛОЧЕНИЕМ АЛЮМИНИЕВОЙ ТРУБКИ В ЛИНИИ КОНФОРМ

Базан Д.А.[1, 2], Горохов Ю.В.[1], Фролов И.В.[3], Косяченко И.С.[1]
[1)] Сибирский Федеральный Университет институт цветных металлов и материаловедения, г. Красноярск, Россия.
[2)] Акционерное общество «Информационные спутниковые системы» имени академика М.Ф. Решетнева», ЗАТО г. Железногорск, Россия.
[3)] ООО завод «Саранскккабель», г. Саранск, Россия
E-mail: dimabazan2424@mail.ru

CALIBRATION BY DRAWING AN ALUMINUM TUBE IN THE CONFORM LINE

Bazan D.A.[1, 2], Gorokhov Y.V.[1], Frolov I.V.[3], Kosyachenko I.S.[1]
[1)] Siberian Federal University Institute of Non-Ferrous Metals and Materials Science, Krasnoyarsk, Russia
[2)] JSC "Information Satellite Systems" named after Academician M.F. Reshetnev", BUT Zheleznogorsk, Russia.
[3)] OOO plant "Saranskkabel", Saransk, Russia

The purpose of this work was to study technological modes and develop technological equipment based on computer modeling for the application of tube calibration in the Conform line.

При непрерывном прессовании способом Конформ трубок из сплава АД0 диаметром 8–20 мм в ряде случаев наблюдается отклонение размеров поперечного сечения выше допустимых пределов. В связи с этим возникает необходимость калибровки отпрессованной и охлажденной трубки в волоке, что позволит уменьшить поле допусков на размеры трубки, повысить прочность и степень чистоты ее поверхности [1]. При этом в значительной мере исключается образование трещин на внутренней поверхности трубки в местах изгиба при изготовлении радиаторов. Воспользовавшись формулами для определения силы волочения труб на оправке [2], предложенными сотрудниками Российского научно – исследовательского института трубной промышленности (г. Челябинск), процесс калибровки трубки разобьём на две стадии: первая – небольшая раздача с увеличением диаметра на 0,2 мм; вторая – калибровка по наружному и внутреннему диаметрам с допуском в пределах 0,01 мм. Суммарная сила протяжки P, рассчитана по формуле (1) для трубки наружным диаметром 8 мм и толщиной стенки 1 мм:

$$P=k*\pi*D_{ср}*S*\sigma_{в}*(d1*d2)/d1 \quad (1)$$

где $D_{ср}$ – средний диаметр трубки, мм; S – толщина стенки, мм; $\sigma_{в}$ – временное сопротивление разрыву материала трубки АД0, МПа; d1, dк –

диаметры оправки при раздаче и калибровке, мм; k – коэффициент, учитывающий силу на преодоление трения.

Подставив в формулу (1) численные значения для трубки диаметром 8 мм и толщиной стенки 1 мм, получим:

$$P=1,3*3.14*8*1*80*(8,2-8)/8,2=64Н \quad (1)$$

Формулу (1) можно использовать при силовых расчетах и на другие сплавы и размеры трубки.

Размеры оправки рассчитывают с учетом внутреннего диаметра трубки при раздаче и величины угла обжимающего конуса волоки α. Материал волоки и оправки – сталь 40ХН, У8А или подобные, HRC50-55.

Осуществление задачи оправки внутрь трубки в ходе процесса непрерывного прессования [4] проводят при наладочной скорости вращения колеса. Калиброванный конец трубки задают в зажим намоточного устройства, после чего скорость колеса выводят на рабочий режим. На основании данных расчетов разработаны рекомендации по изготовлению оснастки для применения калибровки трубки в промышленной линии Конформ [5].

1. Горохов Ю.В., Беляев С.В., Усков И.В. и др. Применение процесса совмещенного литья-прессования при изготовлении алюминиевой проволоки для пайки волноводов // Изв. вузов. Цветная металлургия. 2016. № 6. С. 65–70.
2. Бульхим А.К., Кидяев В.Ф., Кижаев О.А. "Электропривод и автоматизация волочильного оборудования" Часть 1. Самара-2002.
3. Халафян, А.А. Промышленная статистика: Контроль качества, анализ процессов, планирование эксперимента в пакете STATISTICA: Учебное пособие. М.: Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2013. – 384 с.
4. Сидельников, С.Б. Комбинированные и совмещенные методы обработки цветных металлов и сплавов / С.Б. Сидельников, Н.Н. Довженко, Н.Н. Загиров. - М.: МАКС Пресс, 2005. - 344 с.
5. Горохов, Ю.В. Основы проектирования процессов непрерывного прессования металлов: монография / Ю.В. Горохов, В.Г. Шеркунов, Н.Н. Довженко [и др.]. - Красноярск: Сиб. федер. ун. -т, 2013. - 224 с.

МЕХАНОАКТИВИРОВАННЫЙ АНАТАЗ КАК СОРБЕНТ И ФОТОКАТАЛИЗАТОР ДЛЯ УДАЛЕНИЯ Cr(VI) ИЗ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ

Печищева Н.В.[1], Бурдина Л.Г.[1], Зайцева П.В.[1], Сушникова А.А.[1], Эстемирова С.Х.[1], Конышева Е.Ю.[1], Шуняев К.Ю.[1]
[1)] Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук, Екатеринбург, Россия
E-mail: burdina.lg@gmail.com

MECHANICALLY ACTIVATED ANATASE AS A SORBENT AND PHOTOCATALYST FOR THE REMOVAL OF Cr(VI) FROM AQUEOUS SOLUTIONS

Pechishcheva N.V.[1], Burdina L.G.[1], Zaitceva P.V.[1], Sushnikova A.A.[1], Estemirova S.Kh.[1], Konysheva E.Yu.[1], Shunyaev K.Yu.[1]
[1)] Institute of Metallurgy of the Ural Branch of Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia

A method for modifying anatase has been developed, which improves its ability to remove Cr(VI) from aqueous solution by adsorption. A photocatalytic conversion of Cr(VI) to Cr(III) occurs first.

Загрязнение окружающей среды в результате промышленной деятельности человека приводит к накоплению шестивалентного хрома в почве и в поверхностных водах. Ионы Cr(VI) токсичны, их хроническое воздействие на организм может приводить к развитию онкологических заболеваний. Поскольку соединения хрома не разлагаются в естественных условиях, используют различные методики очистки воды от токсичных примесей [1].

Диоксид титана – недорогой, химически стабильный материал, широко применяемый в качестве адсорбента и фотокатализатора. На свойства TiO_2 можно воздействовать путем модификации структуры и состава поверхности его частиц, а также изменяя удельную поверхность [2]. Одним из наиболее простых в исполнении вариантов модификации является механоактивация [3].

Методика механоактивации, применяемая в данной работе, заключается в высокоэнергетическом размоле анатаза в минимальном количестве изопропанола в течение 80 мин. После механоактивации методом рентгеновской дифракции показано изменение фазового состава образца: адсорбент после размола представляет собой 75 % анатаза (ОКР около 50 нм) + 25 % рутила (ОКР около 10 нм). Величина удельной поверхности возросла более чем в 3 раза - до 36.2 $м^2/г$. После механоактивации величина ширины запрещенной зоны, рассчитанная по спектрам диффузного отражения, уменьшилась с 3.23 эВ до 2.88 эВ.

Изучено влияние механоактивации на степень адсорбции общего хрома и эффективность превращения Cr(VI) в Cr(III) в зависимости от pH раствора в интервале 3.8-6.3 в среде ацетатного буфера без освещения и под действием освещения светодиодом с максимумом интенсивности при 386 нм. Результаты экспериментов показали, что без освещения изучаемые характеристики механоактивированного адсорбента незначительно отличаются от исходного образца, но при освещении степень адсорбции хрома, как и степень превращения шестивалентного хрома в трехвалентный существенно возрастает.

Образцы до и после сорбции были проанализированы методом РФЭС. По полученным данным, в обоих образцах, независимо от первоначальной обработки, после сорбции хрома поверхностная концентрация Ti^{3+} понижается как на поверхности, так и в наноразмерном приповерхностном слое. После сорбции хром регистрируется на поверхности сорбентов в двух формах – Cr(III) и Cr(VI), причем относительное количество трехвалентного хрома выше в образце, подвергнутого механоактивации.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект № 21-73-20039.

1. Ukhurebor K.E., Aigbe U.O., Onyancha R.B., et al. Journal of Environmental Management, P. 111809, (2021). .
2. Chen H., Nanayakkara C.E., Grassian V.H. Chemical reviews, V. 112, No. 11, P. 5919-5948, (2012).
3. Uzunova-Bujnova M., Dimitrov D., Radev D. et al. Materials Chemistry and Physics, V. 110, No. 2-3, P. 291-298, (2008).

ПОЛУЧЕНИЕ ПОРОШКОВ НА ОСНОВЕ ДИОКСИДА ЦИРКОНИЯ ДЛЯ ИЗУЧЕНИ СВОЙСТВ КЕРАМИКИ

Чехова А.С.[1], Хорошавцева Н.В.[1], Беспоместных Ю.А.[1], Денисова Э.И.[1], Карташов В.В.[1], Денисова О.В.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: chekhovaaaaa@mail.ru

PRODUCTION OF POWDERS BASED ON ZIRCONIUM DIOXIDE FOR ELECTRICALLY CONDUCTING CERAMICS

Chekhova A.S.[1], Khoroshavtseva N.V.[1], Bespomestnykh J.A.[1], Denisova E. I.[1], Kartashov V.V.[1], Denisova O. V.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Powders of various compositions based on ZrO_2, doped with Y_2O_3 and Sc_2O_3 were obtained to measure electrical conductivity of ceramic samples based on them.

При создании топливных элементов определяющим фактором является выбор твердого электролита. К материалам твердых электролитов предъявляются высокие требования, в частности, высокая кислород-ионная проводимость при рабочей температуре элемента, высокая электропроводность, механическая прочность, химическая и высокотемпературная стабильность. Материалы твёрдых электролитов на основе стабилизированного диоксида циркония на сегодняшний день являются одними из наиболее востребованных для практического применения.

Предметом исследований была керамика на основе ZrO_2 с различным содержанием стабилизирующих добавок Y_2O_3 и Sc_2O_3. Из порошков, полученных методом обратного осаждения, были спрессованы керамические образцы, после чего были исследованы их свойства. По результатам рентгенофазового анализа было определено, что в структуре всех образцов преобладает тетрагональная фаза. Электропроводность образцов измеряли двухзондовым методом на переменном токе при частоте 20 кГц в интервале 873К-1173 К. Результаты измерений, представленные на рисунке, показывают, что самыми высокими значениями электропроводности обладала керамика состава ZrO_2-2мол.%Y_2O_3-7мол.%Sc_2O_3. В дальнейшем планируется подвергнуть образцы температурной деградации при 900 ˚С и повторно провести измерения электропроводности.

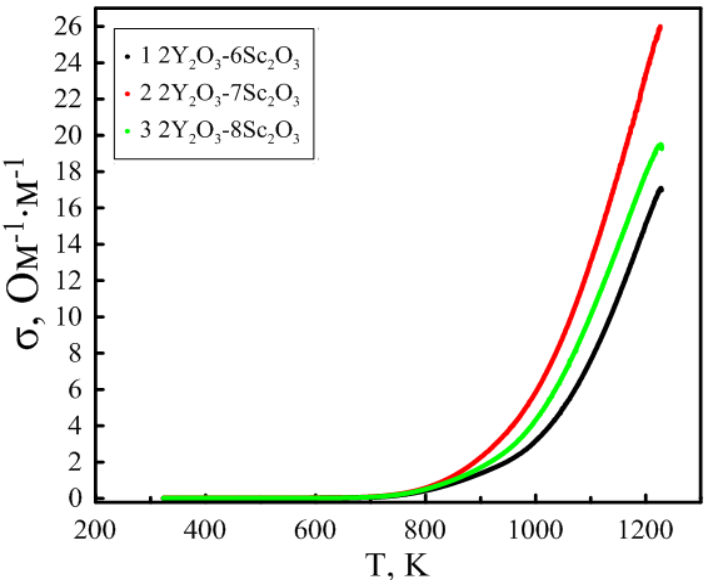


Рис. 1. Температурная зависимость удельной электропроводности

ПРОТОННЫЙ ПЕРЕНОС В СЛОИСТЫХ ПЕРОВСКИТАХ $BaLa_{0.9}M_{0.1}InO_4$ (M = Nd, Gd) И $BaLaIn_{0.9}M_{0.1}O_4$ (M = Sc, Y)

Черемисина П.В.[1, 2], Абакумова Е.В.[1, 2], Бедарькова А.О.[1, 2], Тарасова Н.А.[1, 2], Анимица И.Е.[1, 2]

[1)] Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

[2)] Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: polinatcher@gmail.com

PROTON TRANSFER IN LAYERED PEROVSKITES $BaLa_{0.9}M_{0.1}InO_4$ (M = Nd, Gd) AND $BaLaIn_{0.9}M_{0.1}O_4$ (M = Sc, Y)

Cheremisina P.V.[1, 2], Abakumova E.V.[1, 2], Bedarkova A.O.[1, 2], Tarasova N.A.[1, 2], Animitsa I.E.[1, 2]

[1)] Institute of High Temperature Electrochemistry, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia

[2)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The complex oxides $BaLa_{0.9}M_{0.1}InO_4$ and $BaLaIn_{0.9}M_{0.1}O_4$ were synthesized by the solid phase method. The possibility of water absorption is proven by thermogravimetric measurements. The electrical conductivity was measured by changing T and pH_2O.

В настоящее время протонные проводники имеют высокую практическую значимость и широкую область применения, например, в качестве электролитов в твердооксидных топливных элементах (ТОТЭ). Это обуславливает активные исследования в области разработки новых керамических материалов с высоким уровнем протонной проводимости.

Заметим, что использование протонных проводников в ТОТЭ по сравнению с кислородно-ионными проводниками имеет ряд преимуществ, таких как снижение рабочей температуры и повышение эффективности ТОТЭ.

Большинство протонпроводящих сложных оксидов имеют структуру перовскита ABO_3 или производную от нее. В таких структурах перенос протона обеспечивается диссоциативным поглощением воды из газовой фазы в кристаллическую решетку твердого оксида.

Блочно-слоевая структура соединений Раддлесдена-Поппера содержит солевые блоки [A,A′−O], разделяющие октаэдры [BO_6] перовскитных слоев [$A_{¾}A'_{¼}B'O_4$], что приводит к появлению межслоевого пространства. При обработке во влажной атмосфере, в структуре данных фаз формируются протонные дефекты, что обуславливает возникновение протонной проводимости.

Для сложных оксидов данной структуры ранее было показано, что при введении допанта в катионные подрешетки La и In увеличивается межслоевое расстояние, что приводит к росту водопоглощения, что, в свою очередь,

увеличивает концентрацию протонов в структуре. В конечном счете это допирование приводит к увеличению показателей электропроводности.

Однако фундаментальные закономерности переноса протонов, в частности, влияние природы допанта на количество поглощаемой воды на настоящий момент еще не установлены.

Целью данной работы было установить влияние природы допанта на значение проводимости.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 22-79-10003

1. Tarasova N., Bedarkova A., Animitsa I., Materials, 15(20), 7351 (2022)

РАЗМЕРНЫЙ ЭФФЕКТ В МАГНЕТОКАЛОРИЧЕСКИХ МАНГАНИТАХ $Nd_{0.85}Me_{0.15}MnO_3$ (ME=Ca, Sr, Ba)

Черепанова Л.А.[1], Митрофанов В.Я.[1], Эстемирова С.Х.[1, 2], Упоров С.А.[1]
[1)] Институт Металлургии Уральского отделения РАН, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: freefly88@mail.ru

THE SIZE EFFECT IN MAGNETOCALORIC MANGANITES $Nd_{0.85}Me_{0.15}MnO_3$ (Me=Ca, Sr, Ba)

Cherepanova L.A.[1], Mitrofanov V.Ya.[1], Estemirova S.Kh.[1, 2], Uporov S.A.[1]
[1)] Institute of Metallurgy, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia
[2)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

We modified the magnetic properties of the $Nd_{0.85}Me_{0.15}MnO_3$ manganite by changing the average radius of the ion in the A-position Nd^{3+}→Ca^{2+},Sr^{2+},Ba^{2+}.We show that the paramagnetic (PM)-ferromagnetic (FM) transition temperature and the Curie-Weiss temperature change increase with increasig Me^{2+} radius

Открытие магнитокалорического эффекта (МКЭ) в манганитах редкоземельных элементов значительно расширило спектр МКЭ-материалов для технологий магнитного охлаждения [1]. Кристаллическая структура манганитов предполагает высокую степень химической универсальности и структурной толерантности, что позволяет настраивать их свойства для различных приложений, в том числе их МКЭ-характеристики для использования их в качестве МКЭ-хладогентов [2]. В данной работе мы исследовали влияние среднего радиуса иона в R-позиции (<r>) перовскитоподобной структуры $RMnO_3$ на структурные и магнитные свойства, а также МКЭ-характеристики.

Однофазные манганиты $Nd_{0.85}Me_{0.15}MnO_3$ (Me= Ca, Sr, Ba) синтезированы по керамической технологии при T=1300°C. Анализ кристаллической структуры монофазных образцов показал закономерное увеличении параметров элементарной ячейки с увеличением <r> (рис. 1a). Ионные радиусы Me^{2+} различаются значительно и возрастают в ряду: Ca^{2+}, Sr^{2+}, Ba^{2+} (1.34, 1.44, 1.61 Å соответственно [3]). Для оценки динамики искажений элементарной ячейки были использованы следующие параметры: спонтанная орторомбическая деформация (s), фактор стерического искажения (D), определяемые оба через параметры элементарной ячейки; а также параметр, характеризующий искажение октаэдров, вызванное эффектом Яна-Теллера (Δ), рассчитанный через отклонение расстояний Mn-O относительно среднего значения <Mn−O>. Рисунок 1 свидетельствует, что с увеличением $<r_A>$все типы искажений редуцируют.

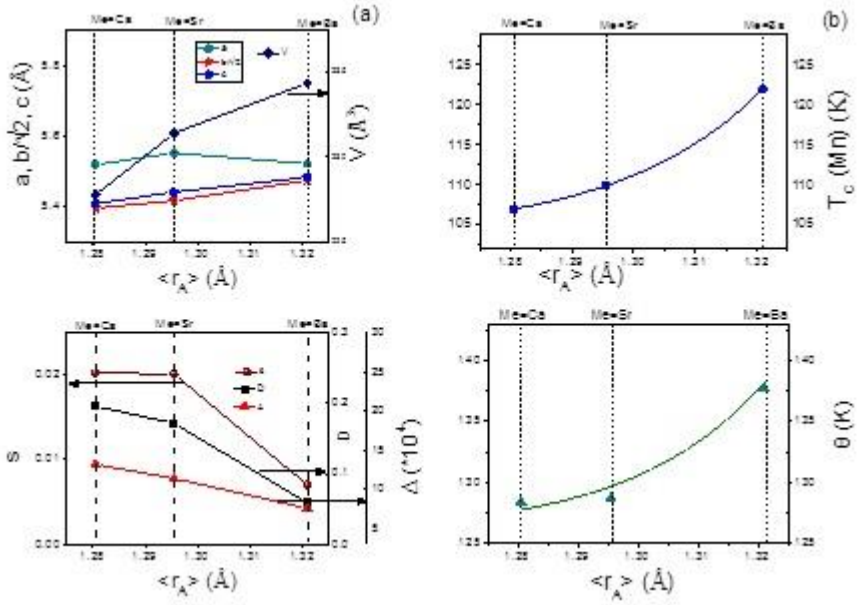


Рис. 1. Зависимость параметров элементарной ячейки и коэффициентов искажения орторомбической структуры (пр. гр. Pnma) s, D и T_w (см. в тексте) от $<r_A>$ (а); магнитные характеристики: зависимость T_C и T_w от $<r_A>$ образцов $Nd_{0.85}Me_{0.15}MnO_3$ (Me= Ca, Sr, Ba,).

Из данных по температурной зависимости намагниченности были определены температуры магнитного фазового перехода в подрешетке марганца (Рис. 1б). На рис. 1б приведены также зависимости парамагнитных температур Кюри-Вейсса от <r>. Как следует из Рис. 1б наблюдается однозначная корреляция между изменением температур T_c и T_w от $<r_A>$, т.е. T_c и T_w увеличиваются с ростом $<r_A>$. Как следствие, T_c(Mn) зависит от параметров кристаллической структуры: длины связи Mn-O и угла связи Mn-O-Mn. Отметим, что с понижением температуры наблюдается также ферромагнитное упорядочение ионов Nd при T_c(Nd) = 12 K.

Установлено, что полученные значения относительной мощности охлаждения (RCP) составляют порядка 86 % от чистого Gd (прототип магнитного хладагента) и превышают соответствующие значения в исследованных ранее манганитах.

Работа выполнена по Государственному заданию ИМЕТ УрО РАН в рамках Программы фундаментальных исследований государственных академий по теме 0369-2019-0001 с использованием оборудования ЦКП «Урал-М».

1. N.R. Ram, M. Prakash, U. Naresh, et al. J. Supercond. Nov. Magn. 31, 1971–1979 (2018)
2. M.-H. Phan, S.-C. Yu, J. Magn. Magn. Mater. 308, 325–340 (2007
3. R.D. Shannon, Acta Cryst. A, 32б 751-767 (1976).

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ПОЛНОГО СПЛАВА ГЕЙСЛЕРА Mn_2NiAl

Чернов Е. Д.[1], Лукоянов А. В.[1, 2]
[1)] Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Уральский Федеральный Университет, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: chernov_ed@imp.uran.ru

ELECTRONIC STRUCTUREAND MAGNETIC PROPERTIES OF THE FULL HEUSLER Mn_2NiAl ALLOY

Chernov E. D.[1], Lukoyanov A. V.[1, 2]
[1)] M.N. Mikheev Institute of Metal Physics of Ural Branch of Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russia
[2)] Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia

In this work, theoretical calculations of the electronic structure and magnetic properties of Mn_2NiAl were carried out in order to investigate the effect of electron correlations in the Mn 3d shell.

Сплавы Гейслера – обширное семейство материалов, которые являются металлами, полупроводниками, сверхпроводниками, топологическими изоляторами или другими типами соединений [1]. Отдельные сплавы Гейслера на основе марганца обладают потенциалом применения в качестве полуметаллических материалов, ферромагнитных сплавов с памятью формы и других функциональных материалов, например, в устройствах спинтроники [2]. Обратный сплав Гейслера Mn_2NiAl представляет особый научный интерес [3,4]. Mn_2NiAl кристаллизуется в кубической F43m структуре (номер пространственной группы 216) с параметром решетки 5.795 Å [4]. Ранее в эксперименте были выявлены аномалии в температурной зависимости намагниченности Mn_2NiAl, а величина намагниченности принимает значения до 0.2 μ_B [4]. Однако теоретические исследования не могут воспроизвести столь малую величину намагниченности исследуемого соединения [3]. В данной работе были выполнены теоретические расчеты электронной структуры и магнитных свойств соединения Mn_2NiAl с использованием программного пакета Quantum Espresso [5] в рамках метода DFT+U или гибридного функционала HSE для учета эффектов электронных корреляции в 3d-оболочке Mn. Значения параметра кулоновского взаимодействия варьировались от 1 до 6 эВ, при этом параметр J был зафиксирован как 0.86 эВ. Установлено, что равновесный параметр решетки для Mn_2NiAl равен 6.10 Å для всех значений U. Из расчетов было установлено, что сплав проявляет металлические свойства и обладает ферримагнитным упорядочением во всех случаях, а с ростом кулоновского параметра электронные состояния марганца смещаются, но при этом

электронная щель не открывается. Кроме того, с увеличением параметра U полный магнитный момент Mn_2NiAl уменьшается. Для расчета с параметром решетки 5.795 (6.10) Å при U, равном 6 (3) эВ, полный магнитный момент значительно падает и достигает экспериментального значения. В расчетах с использованием гибридного функционального HSE также были обнаружены значения полного магнитного момента Mn_2NiAl очень близкие к экспериментальным. Таким образом, наше теоретическое исследование продемонстрировало необходимость учета электронных корреляций для ионов марганца в Mn_2NiAl для правильного описания его магнитных свойств.

Это исследование было поддержано грантом Российского научного фонда № 22-22-20109.

1. T. Graf, C. Felser, S. S.P. Parkin, Prog. Solid. State Chem. 39, 1-50 (2011).
2. H. Ohno, Science 281, 951 (1998).
3. R. Masrour, A. Jabar, E.K. Hlil, M. Hamedoun, et al., J. Magn. Magn. Mater. 428, 12-16 (2017).
4. V. V. Marchenkov, V.Y. Irkhin, Yu. A. Perevozchikova, et al., J. Exp. Theor. Phys. 128, 919–925 (2019).
5. P. Giannozzi, et al., J. Phys. Condens. Matter. 21, 395502 (2009).

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОПЕРЕНОСА ПРИ ИЗМЕРЕНИИ ТЕМПЕРАТУРОПРОВОДНОСТИ РАСПЛАВА СОЛИ LiF–NaF–KF МЕТОДОМ ЛАЗЕРНОЙ ВСПЫШКИ

Чернышев С.В.[1, 2], Руденко А.В.[2], Хрустов А.В.[2], Редькин А.А.[2], Власов М.И.[2]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: umbvargas@gmail.com

NUMERICAL SIMULATION OF HEAT TRANSFER IN MEASURING THE THERMAL DIFFUSIVITY OF THE LiF–NaF–KF MOLTEN SALT BY LASER FLASH TECHNIQUE

Chernyshev S.V.[1, 2], Rudenko A.V.[2], Khrustov A.V.[2], Redkin A.A.[2], Vlasov M.I.[2]
[1)] Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia
[2)] Institute of High-Temperature Electrochemistry, Ekaterinburg, Russia

Accurate measurement of the FLiNaK's molten salt thermal diffusivity is currently an urgent and important task. In this work, the thermal diffusivity of the FLiNaK's molten salt is measured by laser flash technique, and numerical simulation is carried out in the COMSOL Multiphysics.

В настоящее время одним из наиболее перспективных ядерных реакторов следующего поколения считается жидкосолевой реактор (ЖСР) [1,2], в котором теплоносителем выступает расплав солей металлов. В этой связи большую роль играют теплофизические свойства расплавленных солей, тесно связанные с характеристиками теплопередачи, которые необходимы для инженерного проектирования конструкции активной зоны реактора и систем теплопередачи и хранения. Одной из наиболее перспективных для применения в ЖСР является эвтектическая фторидная соль 46.5мол.%LiF–11.5мол.%NaF–42мол.%KF (FLiNaK) [3], обладающая хорошей теплопередающей и аккумулирующей способностями. Однако ее теплофизические свойства достаточно плохо изучены [4], в связи с чем целью данной работы было изучение температуропроводности расплава FLiNaK методом лазерной вспышки.

Измерения выполнены на установке Netzsch LFA 467 HT HyperFlash. Конструкция ячейки выполнена из никеля, покрытого тонким слоем графита. Выявлено, что на проведение опыта значительное влияние оказывает геометрия ячейки. Экспериментально подобрана конструкция ячейки, позволяющая получать более достоверные результаты за счет увеличения механической стойкости и уменьшения теплопереноса через конструкцию ячейки. Однако полностью исключить фактор отклонения реальной геометрии ячейки от заданной невозможно, в связи с чем перед измерением FLiNaK ячейка

калибровалась с использованием воды как эталона. Результаты измерения температуропроводности FLiNaK с учетом калибровочного коэффициента представлены на рис.1 (а).

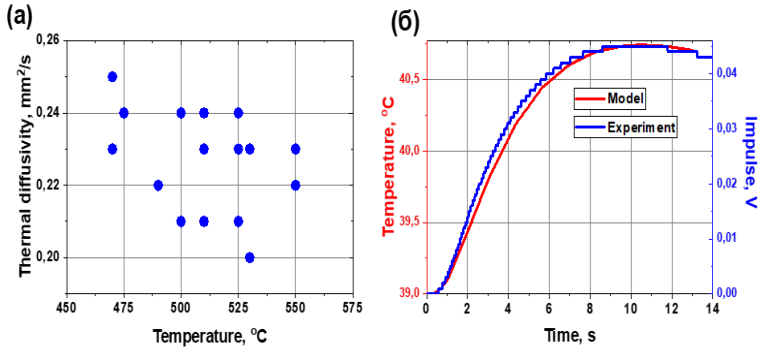


Рис.1. Экспериментально измеренная температуропроводность расплава соли FLiNaK с учетом калибровочного коэффициента (а) и сравнение модельной кривой изменения температуры от времени в центральной точке ячейки с экспериментальной при измерении температуропроводности воды (б).

Разработана модель в расчетной среде COMSOL Multiphysics, описывающая процесс теплопереноса и распределение температуры в ячейке методом конечных элементов. Сравнение модельной кривой изменения температуры от времени в центральной точке ячейки с экспериментальной при измерении температуропроводности воды представлено на рис.1 (б). Рассматривается нестационарный процесс теплопереноса в исследуемой ячейке посредством четырех механизмов – теплопроводности, естественной и вынужденной конвекции и излучения. Геометрия ячейки задана параметрически. Изучается процесс теплопереноса при конечной длительности теплового воздействия на нижнюю стенку ячейки. Время воздействия и тепловой поток принимаются равными реальным параметрам теплового воздействия в эксперименте. Получена хорошая сходимость экспериментальных и расчетных кривых изменения температуры. Расчет теплофизических параметров и параметризированная геометрия ячейки в модели позволяет быстро анализировать вклад конструкции в проводимые измерения и подобрать оптимальные размеры.

1. V. V. Ignatiev, Molten Salt Reactors. Reference Module in Earth Systems and Environmental Sciences (2020).
2. Dr. Charles, W. Forsberg, Molten Salt Reactors (MSRs), The Americas Nuclear Energy Symposium (2002)
3. D.E. Holcomb, S.M. Cetiner, An overview of liquid-fluoride-salt heat transport systems, ORNL/TM-2010/156, 2010.
4. J. Ambrosek, M. Anderson, K. Sridharan, Current status of knowledge of the fluoride salt (FLiNaK) heat transfer, Nucl. Technol. 165 (2), 166–173 (2009)

ИССЛЕДОВАНИЕ ВАКАНСИЙ НА ДВУМЕРНОМ СЛОЕ h-BCN

Четвериков И.В.[1], Борознина Е.В.[1]
[1)] Волгоградский государственный университет, г. Волгоград, Россия
E-mail: NMTB-201_985619@volsu.ru

STUDY OF VACANCY ON A TWO-DIMENSIONAL h-BCN LAYER

Chetverikov I.V.[1], Boroznina E.V.[1]
[1)] Volgograd State University, Volgograd, Russia

The appearance of vacancies on the surface of a two-dimensional BCN layer is investigated. The research was carried out using the density functional theory. Vacancies formed by splitting atoms from the BCN layer were investigated.

Последние годы большого успеха достигли исследования, связанные с графеном – двумерная аллотропная модификация углерода. В связи с этим, по всему миру ученые начали исследования новых двумерных структур и соединений веществ, которые обладали бы еще более лучшими свойствами относительно графена в разных областях их потенциального применения. Одной из таких структур является двумерный слой гексагонального карбонитрида бора h-BCN [1]. Ключевой особенностью данного слоя является то, что фактически он состоит из смеси углеродных связей C-C и боро-нитридных B-N, что в свою очередь позволяет изменять проводящие свойства материала, путем изменения концентрации связей B-N, в связи с этим проводятся широкие исследования относительно свойств данной структуры, а также ее синтеза. Таким образом данный материал является одним из наиболее привлекательных для изучения в настоящий момент. Например, ожидается что данное соединение будет перспективно в областях нано-электроники.

Исследования формирования вакансий проводились на кластере (рис.1).

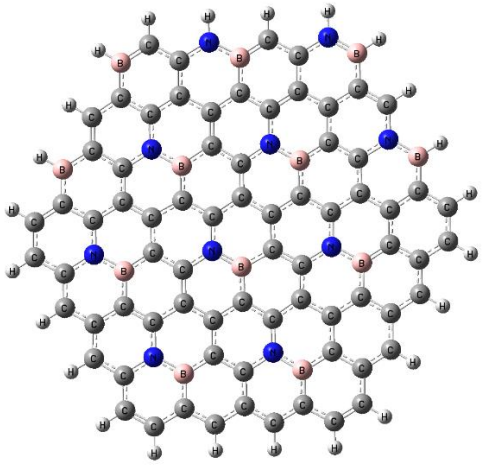


Рис. 1. Двумерный слой h-BCN.

Границы кластера замыкаются псевдо-атомами водорода, длины связей между атомами в пределах структуры варьируются от 1.36 Å между C-C, до 1.47 Å между B-C, в зависимости от соединенных веществ и положения связи в структуре. Моделирование механизма появления вакансий происходило пошаговым отдалением атомов C, B, N и связи атомов C-B, C-N, B-N, размещенных в середине кластера, для минимизации влияния краевых эффектов, перпендикулярно двумерному слою h-BCN.

Оказалось что при отдаление атомов на расстоянии 1-1.7 Å происходит скачок энергии, который отображает отсоединение атома от слоя и появление вакансии на его месте. Расчеты производились посредством создания фиктивного атома, находящегося на позиции отсоединяемого атома. Далее происходило пошаговое отдаление атома от фиктивного атома с изменением координаты реакции на величину 0.2 Å. По результатам расчетов были построены кривые потенциальной энергии, претерпеваемой атомов при миграции вдоль слоя, а также проведен анализ зонного строения слоя, с построением графиков плотности состояний при различной локализации атомов и вакансий.

1. «Chemical Synthesis and Characterization of Flaky h-BCN at High Pressure and High Temperature», //Yang Da-Peng, Li Ying-Ai, Yang Xu-Xin, Du Yong-Hui, Ji Xiao-Rui, Gong Xi-Liang, Su Zuo-Peng and Zhang Tie-Chen// Received 18 September 2006.

МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА И ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА СИСТЕМЫ СПЛАВОВ $Co_xCu_{2-x}MnAl$

Дедов И.С.[1], Лукоянов А.В[2]
[1)] Уральский Федеральный Университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Институт Физики Металлов имени М.Н. Михеева Уральского Отделения Российской Академии Наук, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: Ilya.Dedov@urfu.me

MAGNETIC PROPERTIES AND ELECTRONIC STRUCTURE OF THE ALLOY SERIES $Co_XCu_{2-X}MnAl$

Dedov I.S.[1], Lukoyanov A.V[2]
[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia B. N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia
[2)] M.N. Mikheev Institute of Metal Physics of Ural Branch of Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russia

Theoretical modeling of the Heusler alloys of the $Co_xCu_{2-x}MnAl$ series for x = 0 – 2 was done. It is found that the total magnetic moment is substantially increased in $Co_{1.5}Cu_{0.5}MnAl$ and CoCuMnAl alloys.

Сплавы Гейслера являются перспективными материалами для спинтроники благодаря уникальным магнитным и электрическим свойствам, обусловленным эффектом спиновой поляризации [1]. В них могут быть реализованы состояния полуметаллического ферромагнетика или спинового бесщелевого полупроводника, антиферромагнетика или скомпенсированного ферримагнетика, топологического полуметалла или фрустрированного магнетика, которые зачастую приводят к аномалиям в их электронных и магнитных свойствах. Помимо внешних факторов (температуры, давления, электрических и магнитных полей), свойства сплавов Гейслера существенно зависят от их кристаллической структуры [2]. В работе проведено теоретическое моделирование сплавов Гейслера серии $Co_xCu_{2-x}MnAl$ для x = 0 – 2. В результате выполненных в рамках теории функционала плотности расчетов электронной структуры соединений Co1.5Cu0.5MnAl, CoCuMnAl, $Co_{0.5}Cu_{1.5}MnAl$, Cu_2MnAl было получено, что данные соединения являются металлами, а Co_2MnAl – полуметаллом. При анализе магнитных моментов было выявлено, что в серии соединений $Co_xCu_{2-x}MnAl$ реализуется ферромагнитное упорядочение магнитных ионов марганца и кобальта. Полный магнитный момент для промежуточных сплавов $Co_{1.5}Cu_{0.5}MnAl$, CoCuMnAl значительно больше, чем в сплаве без Co (Cu_2MnAl) и больше, чем в сплаве с полным замещением атомов Cu атомами Co. Проведенные теоретические расчеты показали, что при изменении содержания переходных металлов происходит

существенное изменение магнитных свойств, в частности, полный магнитный момент меняется с изменением концентрации Co и Cu. Вместе с магнитным моментом, в исследованных соединениях выявлено изменение плотностей электронных состояний. Обнаруженные изменения магнитных характеристик и электронной структуры делают систему сплавов $Co_xCu_{2-x}MnAl$ перспективной для использования в микроэлектронике и других приложениях Co.

Данное исследование поддержано грантом Российского Научного Фонда No 22-42-02021.

1. Felser C., Fecher GH., Balke B. Angew Chem Int Ed (2007). – Vol. 46, P. 66
2. Chadov S, Qi X., Fecher GH., Felser C., Nat. Mat (2010). – Vol. 9, P. 541.

ДЕГРАДАЦИЯ ГИБРИДНЫХ ОРГАНОМЕТАЛЛИЧЕСКИХ ПЕРОВСКИТОВ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ГАММА-ИЗЛУЧЕНИЯ ПО ДАННЫМ РФЭС

Дерендяева Е.П.[1], Озерова В.В.[2], Трошин П.А.[2], Жидков И.С.[1]
[1)] Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия
[2)] ФИЦ ПХФ и МХ РАН, г. Черноголовка, Россия
E-mail: e.p.derendyaeva@gmail.com

DEGRADATION OF HYBRID ORGANOMETALLIC PEROVSKITES UNDER GAMMA-RAY EXPOSURE STUDIED BY XPS

Derendyaeva E.P.[1], Ozerova V.V.[2], Troshin P.A.[2], Zhidkov I.S.[1]
[1)] Ural federal university, Ekaterinburg, Russia
[2)] FRC PCP and MC RAS, Chernogolovka, Russia

We investigate the influence of gamma irradiation on perovskites solar cells by XPS. It has been suggested that PbI2 phase didn't formed under irradiation. To study the degradation processes high-resolution XPS spectra of C, N, Pb and I were taken.

Солнечные батареи широко применяются в качестве источника энергии для орбитальных космических аппаратов. При этом огромное значение играет вес солнечных панелей, который влияет на полезную нагрузку ракетоносителей и на стоимость выведения космических аппаратов на орбиту. Таким образом на передний план, помимо КПД солнечных ячеек, также выходит такой параметр как удельная мощность (производимая энергия на единицу массы). Недавно было продемонстрировано, что перовскитные солнечные панели достигают удельной мощности до 29,4 Вт/г [1]. Помимо снижения затрат, это создает возможности для проектирования новых космических миссий, таких как полеты в дальний космос на солнечной энергии и эффективные электрические двигатели. С другой стороны при использовании ячеек в космическом пространстве на первый план выходит вопрос стабильности фотоэлектрических панелей, поскольку он определяет срок службы космических аппаратов на орбите.

Нами были измерены обзорные спектры и спектры остовных уровней C 1s и N 1s гибридных перовскитов $MAPbI_3$ и $Cs_{0.1}MA_{0.15}FA_{0.75}PbI_3$ в зависимости от дозы γ-облучения (D=10 – 7000 кГр).

Как следует из этих данных, в обзорных спектрах регистрируются только компоненты исследуемых соединений и материала подложки (SiO_2). Наличие неконтролируемых примесей не обнаружено. Предыдущие измерения спектров галогенидных перовскитов, облученных видимым светом [2], показали снижение отношений N:Pb и I:Pb, что стало одним из критериев фотохимической деградации и свидетельствовало о распаде органических катионов и превращении PbI_2-фазы в осадков соответственно. В связи с этим было

интересно посмотреть, как гамма-облучение с очень большими потоками влияет на изменение этих соотношений с дозой облучения. Обнаружено, что систематического снижения отношений N:Pb и I:Pb с дозой облучения не происходит. Прежде всего это означает, что воздействие гамма-излучения не приводит к выделению PbI_2 фазы как продукта радиационной деградации. Далее эти результаты указывают, что гамма-облучение перовскитов, по-видимому, сопровождается образованием металлических вакансий.

Для изучения химического состояния атомов азота и углерода органических катионов были измерены РФЭС C 1s и N 1s-спектры с высоким энергетическим разрешением. Характерно, что для $MAPbI_3$ уже при начальной дозе облучения 10 кГр сигнал от связей C–N сильно снижается и в дальнейшем с увеличением дозы уже не изменяется, что свидетельствует о частичном распаде метиламмоний-катиона. РФЭС C 1s и N 1s-спектры облученного $Cs_{0.1}MA_{0.15}FA_{0.75}PbI_3$ показывают совершенно иное поведение. Эти спектры обнаруживают совершенно замечательную стойкость к γ-облучению до D=2000 кГр и практически не отличаются от спектров свежеприготовленного образца.

Исследование спектров РФЭС выполнено при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Программы развития Уральского федерального университета имени первого Президента России Б.Н. Ельцина в соответствии с программой стратегического академического лидерства "Приоритет-2030".

1. Kang S. et al. Ultrathin, lightweight and flexible perovskite solar cells with an excellent power-per-weight performance // J. Mater. Chem. A. – 2019. – Vol. 7, № 3. – P. 1107–1114.
2. Zhidkov I.S. et al. XPS spectra as a tool for studying photochemical and thermal degradation in APbX3 hybrid halide perovskites // Nano Energy. – Elsevier Ltd, 2021. – Vol. 79, № July 2020. – P. 105421.

ТЕРМИЧЕСКИЕ, СТРУКТУРНЫЕ И ФЛЮОРЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА $(Sm_{0.5}Eu_{0.5})(Fe_{0.5}Cr_{0.5})O_3$

Ермолаева Ю.В.[1, 2], Конышева Е.Ю.[1], Ведмидь Л.Б.[1], Федорова О.М.[1], Печищева Н. В.[1, 2]

[1)] Институт металлургии УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

[2)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: ermolaeva-yulechka@inbox.ru

THERMAL, STRUCTURAL AND FLUORESCENCE PROPERTIES OF $(Sm_{0.5}Eu_{0.5})(Fe_{0.5}Cr_{0.5})O_3$

Ermolaeva J.V.[1, 2], Konysheva E.Yu.[1], Vedmid' L.B.[1], Fedorova O.M.[1], Pechishcheva N.V.[1, 2]

[1)] Institute of Metallurgy of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia

[2)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

$(Sm_{0.5}Eu_{0.5})(Fe_{0.5}Cr_{0.5})O_3$ was synthesized by solid state method and exhibits the perovskite structure with orthorhombic distortions. The compound demonstrates good thermal, structural, and chemical stability under air and nitrogen. Evolution of the lattice parameters with temperature is discussed.

Сложнооксидные соединения феррито-хромитов редкоземельных элементов представляют интерес для изучения 3d и 4f электронных взаимодействий между B-подрешеткой катионов переходных металлов и A-подрешеткой редкоземельных катионов. В данной работе соединение $(Sm_{0.5}Eu_{0.5})(Fe_{0.5}Cr_{0.5})O_3$ было синтезировано методом твердофазного синтеза. Для аттестации $(Sm_{0.5}Eu_{0.5})(Fe_{0.5}Cr_{0.5})O_3$ использовали метод рентгенофазового и рентгеноструктурного анализа, метод термогравиметрического анализа (ТГА), дифференциальную сканирующую калориметрию (ДСК) и флуоресцентную спектроскопию.

Соединение $(Sm_{0.5}Eu_{0.5})(Fe_{0.5}Cr_{0.5})O_3$ проявляет структуру перовскита с орторомбическим искажением, пространственная группа Pbnm, № 62. Изменение параметров элементарной ячейки синтезированной фазы было изучено на воздухе в температурном интервале 25 - 900 ^{O}C. По данным ТГА, масса образца оставалась практически постоянной (0.29%) при нагреве на воздухе до 1000 ^{O}C, что свидетельствует об отсутствии обмена по кислороду между $(Sm_{0.5}Eu_{0.5})(Fe_{0.5}Cr_{0.5})O_3$ и газовой фазой. На кривой ДСК нет очевидных пиков, что также указывает на достаточно хорошую термическую, структурную и химическую стабильности образца, как на воздухе, так и в атмосфере азота. Методом ДСК была измерена теплоемкость, которая изменяется от 0.43 до 0.47 Дж/(г×К) в температурном интервале от 30 до 540 ^{O}C. Флюоресценция, типичная

для индивидуальных оксидов редкоземельных элементов, исчезает в $(Sm_{0.5}Eu_{0.5})(Fe_{0.5}Cr_{0.5})O_3$ со структурой перовскита.

Работа выполнена по Государственному заданию ИМЕТ УрО РАН по теме НИР FUMR-2022-0001 и при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках программы развития УрФУ «Приоритет - 2030» №122080100074-1.

ДЕФОРМАЦИОННО-ДИНАМИЧЕСКОЕ СТАРЕНИЕ В ОБРАЗЦАХ ИЗ АУСТЕНИТНОЙ СТАЛИ, ПОЛУЧЕННЫХ ЛАЗЕРНОЙ 3D ПЕЧАТЬЮ

Ежов И.В.[1, 2], Коэмец Ю.Н.[1], Казанцева Н.В.[1], Давыдов Д.И.[1], Афанасьев С.В.[1], Коэмец О.А.[2]

[1)] Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

[2)] Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: ezhov@imp.uran.ru

DEFORMATION-DYNAMIC AGING IN SAMPLES OF AUSTENITIC STEEL MANUFACTURED BY LASER 3D PRINTING

Ezhov I.V.[1, 2], Koemets Yu.N.[1], Kazantseva N.V.[1], Davydov D.I.[1], Afanasiev S.V.[1], Koemets O.A.[2]

[1)] Institute of Metal Physics named after M.N. Mikheev Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia

[2)] Ural Federal University named after the first President of Russia B.N.Yeltsin, Yekaterinburg, Russia

Specimens after deformation from 316L austenitic steel manufactured by selective laser melting (SLM) were studied. It was found that the presence of a large number of pores affects the nature of the deformation of the porous SLM sample of steel 316L.

Пористые образцы из стали 316L были изготовлены на металлическом лазерном принтере Renishaw AM 400 (Renishaw Inc., Wotton-under-Edge, Великобритания), оснащенном лазером мощностью 400 Вт. Для исследования использовался сферический газораспыленный порошок компании Renishaw стандарта ASTM F3184 (сталь 316L). Деформацию образцов проводили на механической испытательной машине Instron на растяжение при комнатной температуре и различных скоростях: 2 мм/мин., 8 мм/мин., 15 мм/мин. Размеры образцов для механических испытаний выбирались по требованиям ГОСТ 1497-84 [1].

Было обнаружено, что при деформации растяжением разрушение происходит по технологическим порам, острые неровные края которых служат конденсаторами напряжений. В то же время установлено, что начальная пористость не влияет на характер разрушения СЛС-образца при растяжении. В условиях растяжения при всех скоростях нагружения СЛС-образцов обнаружено вязкое разрушение по порам, что аномально для обычного материала с высокой пористостью.

Работа выполнена при поддержке проекта РНФ № 22-29-01514.

1. ГОСТ 1497-84. Металлы. Методы испытаний на растяжение (с Изменениями N 1, 2, 3). – Введ. 01.01.1986. – М.: Стандартинформ, 2008. – 26 с.

ИОННАЯ ПРОВОДИМОСТЬ В Ba- И Sr- ЗАМЕЩЕННЫХ СЛОИСТЫХ ПЕРОВСКИТАХ НА ОСНОВЕ $BaLa_2In_2O_7$

Федорова И.С.[1], Абакумова Е.В.[1], Бедарькова А.О.[1, 2], Тарасова Н.А.[1, 2], Анимица И.Е.[1, 2]

[1)] Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия

[2)] Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: irina-fedo_19991999@mail.ru

IONIC CONDUCTIVITY IN Ba- AND Sr-SUBSTITUTED LAYERED PEROVSKITE BASED ON $BaLa_2In_2O_7$

Fedorova I.S.[1], Abakumova E.V.[1], Badarkova A.O.[1, 2], Tarasova N.A.[1, 2], Animitsa I.E.[1, 2]

[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

[2)] Institute of High-Temperature Electrochemistry of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia

Proton-conducting complex oxides with a perovskite structure or a derivative there of have a number of advantages: lower operating temperatures and increased efficiency. They can be used as proton-conducting electrolytes for fuel cells in hydrogen energy.

Водородная энергетика – актуальная и высокотехнологичная отрасль энергетики. Разработка электрохимических устройств, создание сложнооксидных соединений, обладающих протонной проводимостью, все это задачи, которые решают исследователи данного направления. Топливные элементы занимают особое место в области альтернативных источников энергии. Для их работы необходимо создание новых материалов, которые будут характеризоваться определенным набором функциональных свойств.

Протон проводящий электролит, является неотъемлемой частью твердооксидных топливных элементов. Поиск новых соединений с разными вариантами кристаллической структуры (блочно-слоевые структуры) дает новые пути развития данного класса материалов, а также энергетической отрасли в целом. На данный момент перспективными соединениями считаются допированные сложные оксиды на основе $BaLa_2In_2O_7$ [1].

Структура кристаллов изучаемых в работе соединений, основой которых стал сложный оксид $BaLa_2In_2O_7$, состоит из чередования солевых слоев, содержащих атомы лантана (координационное число 9) и кислорода, и перовскитных блоков. Каждый блок, в свою очередь, имеет два слоя октаэдров $[InO_6]$. Атомы бария располагаются в межоктаэдрическом пространстве в перовскитных блоках и характеризуются координационным числом 12.

В настоящей работе впервые получены Sr- и Ba-замещенные сложные оксиды на основе $BaLa_2In_2O_7$, изучены их структура, процессы гидратации и

транспортные свойства. Синтез образцов проводился твердофазным методом. Рентгенографически подтверждена однофазность полученных образцов. Способность к диссоциативному поглощению молекул воды из газовой фазы была подтверждена методом синхронного термического анализа в совокупности с масс-спектрометрией. Электрические свойства полученных образцов исследовались методом импедансной спектроскопии. Исследования выполнялись в атмосферах с различными значениями парциального давления кислорода и паров воды для вычленения вкладов парциальных проводимостей (кислородно-ионной, электронной и протонной).

1. Tarasova N. A , Membranes, 13, 34 (2023).

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ДЛИТЕЛЬНОГО СТАРЕНИЯ НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СПЛАВА VDM® ALLOY 59

Гибадуллина А.Ф.[1], Хотинов В.А.[1], Половов И.Б.[1], Ребрин О.И.[1]
[1)] Уральский федеральный университет
E-mail: A.F.Gibadullina@urfu.ru

EFFECT OF LONG-TERM AGING ON MECHANICAL PROPERTIES OF NICKEL BASE ALLOY VDM® ALLOY 59

Gibadullina A.F.[1], Khotinov V.A.[1], Polovov I.B.[1], Rebrin O.I.[1]
[1)] Ural Federal University

The mechanical properties of nickel alloy VDM® Alloy 59 have been examined after long-term aging in the temperature range 500–600°C for 1000 h. The Portevin-Le Chatelier effect is observed during tensile tests at elevated temperatures.

Сплавы на основе системы Ni–Cr–Mo обладают уникальным сочетанием коррозионной стойкости в различных агрессивных средах и сохранением относительно высокой прочности при повышенных температурах, что позволяет использовать подобные материалы в качестве конструкционных в атомной, химической, нефтехимической отраслях промышленности. Однако одной из характерных особенностей никельхромомолбиденовых сплавов является изменение механических свойств при длительных выдержках при повышенных температурах, в частности упрочнение, связанное с выделением фазы Ni_2 (Cr, Mo), упорядоченной по типу Pt_2 Mo [1].

Данная работа посвящена исследованию влияния длительного старения на механические свойства сплава VDM® Alloy 59 (Ni – 23Cr – 16Mo, мас. %). Оценивались свойства исследуемого сплава в состоянии поставки и после выдержки в течение 1000 ч при температурах 500, 550, 600 °C. Все испытания и обработка результатов были проведены согласно ГОСТ 1497–84 и ГОСТ 9651-84 на разрывной машине Instron 3382, также после определения прочностных свойств был проведён фрактографический анализ. Было показано упрочнение материала и снижение пластичности после выдержки при 550 и 600 °C, а также зафиксирован эффект Портевена – Ле Шателье при испытаниях на растяжение при повышенных температурах.

1. A. Yu. Zhilyakov, S. V. Belikov, A. F. Gibadullina, I. B. Polovov, I. V. Ilikbaev, Metal Science and Heat Treatment, 61, 792, (2020)

АНАЛИЗ ОКАТАННОСТИ КВАРЦА В ПОВЕРХНОСТНО ДЕПОНИРОВАННЫХ ОТЛОЖЕНИЯХ УРБАНИЗИРОВАННОЙ СРЕДЫ (НА ПРИМЕРЕ Г. РОСТОВ-НА-ДОНУ)

Глухов В.С.[1, 2, 3], Панкрушина Е.А.[2, 3], Селезнев А.А.[1, 2], Малиновский Г. П.[1], Ярмошенко И.В.[1]

[1)] Институт промышленной экологии УрО РАН, г. Екатеринбург, Российская федерация
[2)] Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Российская федерация
[3)] Институт геологии и геохимии им. акад. А.Н. Заварицкого УрО РАН, г. Екатеринбург, Российская федерация
E-mail: sativ999@gmail.com

ANALYSIS OF QUARTZ ROUNDNESS IN SURFACE-DEPOSITED SEDIMENTS OF THE URBANIZED ENVIRONMENT (THE EXAMPLE OF ROSTOV-ON-DON)

Glukhov V.S.[1, 2, 3], Pankrushina E.A.[2, 3], Seleznev A.A.[1, 2], Malinovsky G. P.[1], Yarmoshenko I.V.[1]

[1)] Institute of Industrial Ecology UB RAS, Ekaterinburg, Russia
[2)] The Ural Federal University named after the first President of Russia B. N. Yeltsin, Ekaterinburg, Russia
[3)] A. N. Zavaritsky Institute of Geology and Geochemistry UB RAS, Ekaterinburg, Russia

The article presents the results of the analysis of the roundness of quartz particles of the sand fraction from modern deposited surface sediments of Rostov-on-Don, carried out by the developed method including: schlich analysis, Raman spectroscopy, optical microscopy, I. S. Ukhov methodology.

Введение. Изучение морфологии минеральных частиц городских седиментов имеет значение в понимании процессов седиментогенеза городских территорий. Одним из морфологических свойств частиц является окатанность - стремлением частицы приблизиться к гладкой шаровидной или эллипсоидальной форме. Окатанность служит индикатором условий, силы транспортирующей среды и расстояния переноса частиц, между различными средами и ландшафтными зонами. Изменение геометрии частицы, неизбежно ведет к появлению частиц более мелкой фракции, что сопутствует появлению пыли. Пыль, как продукт поверхности более крупных частиц, транспортирует тяжелые металлы и металлоиды (ТММ) [1-4].

Цель исследования: разработать метод оценки окатанности частиц кварца современных депонированных поверхностных отложений для решения геоэкологических задач по оценке влияния класса окатанности частиц на концентрации пыли и ТММ в рассматриваемых седиментах.

Задачи: получить навески 4-6 гр. из 14 проб современных городских седиментов г. Ростов-на-Дону гранулометрической фракции 250-1000 мкм; отобрать из полученных навесок частицы карца; создать базу данных параметров отобранных частиц; определить процент и классы окатанности отобранных частиц; сравнить полученные показатели с данными элементного и минерального состава.

Материалы и методы. Для работы с навесками была разработана методика включающая в себя квартование, шлиховой анализ, оптическую микроскопию, математический метод определения формы зерен породы [5], рамановскую спектроскопию. Районом исследования был выбран г. Ростов-на-Дону. Рассматриваемые образцы современных депонированных поверхностных отложений урбанизированной среды были отобраны в теплое время года в селитебных районах территории города. Пробы прошли: пробоподготовку, деление на гранулометрические фракции; минеральный и элементный анализ фракций [1-3].

Результаты и выводы. Разработаннная методика анализа серых шлихов по окатанности частиц кварца позволила, для 14 проб различного происхождения: отобрать 14 навесок со средней массой 4,81 грамм; выделить 652 частицы, идентифицированные как кварцевые; определить, что к 1 классу окатанности относится всего 1% частиц (5 частиц), ко 2 классу окатанности - 25% (166 частиц) и к 3 классу окатанности 74% (481 частица). Интерпретация полученных данных показала, что природные и техногенные процессы в городской среде приводят к увеличению окатанности частиц кварца в поверхностных городских отложениях. Вследствие влияния окружающей среды на процесс окатывания доля частиц кварца более высокого класса (3-5 класс) окатанности увеличивается со временем, так как часть обломков кварца переходит в пылевую гранулометрическую фракцию. Таким образом, со временем увеличивается доля кварца, приходящаяся на пылевую фракцию. Из этого следует, что доля частиц высокого класса окатанности и доля кварца в пылевой фракции могут рассматриваться, как косвенные характеристики возраста образцов отложений или интегрального воздействия факторов среды на образец.

Работа выполняется при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант № 18-77-10024-П. Исследования методом комбинационного рассеяния выполнены в ЦКП «Геоаналитик» ИГГ УрО РАН. Дооснащение ЦКП проведено при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (соглашение № 075-15-2021-680).

1. Hanfi, M.Y., Yarmoshenko, I.V., Seleznev, A.A. et al. Development of an appropriate method for measuring gross alpha activity concentration in low-mass size-fractionated samples of sediment using solid-state nuclear track detectors. J Radioanal Nucl Chem 323, 1047–1053 (2020). https://doi.org/10.1007/s10967-020-07020-z

2. Yarmoshenko, I.; Malinovsky, G.; Baglaeva, E.; Seleznev, A. A Landscape Study of Sediment Formation and Transport in the Urban Environment. Atmosphere 2020, 11, 1320. https://doi.org/10.3390/atmos11121320
3. Seleznev, A.A., Yarmoshenko, I.V. & Malinovsky, G.P. Urban geochemical changes and pollution with potentially harmful elements in seven Russian cities. Sci Rep 10, 1668 (2020). https://doi.org/10.1038/s41598-020-58434-4
4. Касимов Н.С., Власов Д. В., Кошелева Н. Е., Никифорова Е. М., Геохимия ландшафтов Восточной Москвы. - М.: АПР, 2016. - 276 с.
5. Ухов И. С., Новая методика определения окатанности песчаных кварцевых зерен. Ярославский педагогический вестник – 2013 – № 4 – Том III (Естественные науки)

ИОННАЯ ПРОВОДИМОСТЬ В СЛОИСТОМ ПЕРОВСКИТЕ $SrLa_2Sc_2O_7$

Гнатюк В.Д.[1], Абакумова Е.В.[1, 2], Бедарькова А.О.[1, 2], Тарасова Н.А.[1, 2], Анимица И.Е.[1, 2]

[1)] Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия

[2)] Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: vladislavaright@mail.ru

IONIC CONDUCTIVITY IN LAYERED PEROVSKITE $SrLa_2Sc_2O_7$

Gnatyuk V.D.[1], Abakumova E.V.[1, 2], Bedarkova A.O.[1, 2], Tarasova N.A.[1, 2], Animitsa I.E.[1, 2]

[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

[2)] The Institute of High Temperature Electrochemistry of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia

The layered perovskite $SrLa_2Sc_2O_7$ was investigated as a protonic conductor for the first time. The synthesis was performed using solid state method. The possibility of water absorption was proved by thermogravimetric measurements. The conductivity was measured by changing T and pH_2O.

В настоящее время активно создаются и исследуются новые материалы с заданными свойствами для различных электрохимических устройств преобразования и накопления энергии. Эти устройства должны соответствовать определенным требованиям, таким как высокая эффективность, низкая себестоимость, экологичность и безопасность. Водородная энергетика хорошо удовлетворяет этим критериям, поэтому может считаться одним из наиболее перспективных энергетических источников будущего. Соответственно, необходимо развитие систем для производства, транспортировки и преобразования водорода. Протонный керамический топливный элемент – это электрохимическое устройство, которое преобразовывает энергию химической реакции окисления водорода в электрическую энергию. Основными элементами таких устройств являются электролиты и электроды. Хотя многие материалы исследуются в качестве потенциальных электролитических компонентов для этих устройств, существует множество проблем, включая совместимость между электродами и электролитами. Наиболее изученными материалами с протонной проводимостью, использующимися как электролиты в протонных керамических топливных элементах, являются цераты-цирконаты бария $BaCeO_3$- $BaZrO_3$, характеризующиеся структурой перовскита. Однако, такие перспективные электродные материалы, как никелаты и кобальтаты имеют слоистую структуру. Следовательно, синтез протон-проводящих материалов со слоистой структурой очень важен с точки зрения совместимости между электролитом и электродными материалами.

Слоистые перовскиты могут быть описаны общей формулой $AA'_nB_nO_{3n+1}$, где A представляет собой щелочноземельный металл, такой как барий или стронций, A' представляет собой редкоземельный металл, такой как лантан или неодим, и B представляет собой трехвалентный металл, такой как индий или скандий. Монослойные перовскиты $AA'BO_4$ (n = 1) в качестве протонных проводников были впервые описаны несколько лет назад. Были исследованы такие матричные составы, как $BaNdInO_4$, $BaNdScO_4$, $SrLaInO_4$, $BaLaInO_4$ и другие составы на их основе, также выявлены основные закономерности протонного переноса в допированных монослойных перовскитах. Двухслойные перовскиты с общей формулы $AA'_2B_2O_7$ (n = 2), такие как $BaLa_2In_2O_7$ и $BaNd_2In_2O_7$ были описаны как материалы с протонной проводимостью в 2022 году [1]. Было доказано, что они являются протонными проводниками при температуре ниже 350 ° C во влажном воздухе. Соответственно, двухслойные перовскиты являются перспективным классом материалов с точки зрения их протонной проводимости.

В настоящем исследовании слоистый перовскит $SrLa_2Sc_2O_7$ был впервые исследован в качестве протонного проводника. Были выявлены локальная структура, возможность поглощения воды и протонного переноса.

1. Tarasova N. Layered Perovskites $BaLn_nIn_nO_{3n+1}$ (n = 1, 2) for Electrochemical Applications: A Mini Review // Membranes 2023, 13, 34. doi: 10.3390/membranes13010034

$Pr_{1-x}Ba_xFeO_3$ В КАЧЕСТВЕ ЭЛЕКТРОДНОГО МАТЕРИАЛА ДЛЯ СИММЕТРИЧНЫХ ПРОТОННО-КЕРАМИЧЕСКИХ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ ЯЧЕЕК

Гордеева М.А.[1], Медведев Д.А.[1]
[1)] Институт высокотемпературной электрохимии (ИВТЭ УрО РАН), г. Екатеринбург, Россия
E-mail: maryanaberseneva@mail.ru

$Pr_{1-x}Ba_xFeO_3$ AS AN ELECTRODE MATERIAL FOR SYMMETRIC PROTON-CERAMIC ELECTROCHEMICAL CELLS

Gordeeva M.A.[1], Medvedev D.A.[1]
[1)] Institute of High Temperature Electrochemistry of the Ural Branch of the Russian Academy of sciences, Yekaterinburg, Russia

The samples of $Pr_{1-x}Ba_xFeO_{3-\delta}$ compositions were obtained by a citrate-nitrate combustion method. All the samples crystalized in a cubic structure of perovskite without impurities. Under reducing conditions, the structure of perovskite is retained.

Применение твердооксидных топливных элементов (ТОТЭ) является перспективным и экологичным способом получения электроэнергии [1]. В настоящее время наблюдается рост интереса к ТОТЭ с симметричной конфигурацией, в которых в качестве анода и катода используется один и тот же материал. В связи с этим актуальной является задача получения электродных материалов, обладающих высокой окислительно-восстановительной устойчивостью. В рамках данного исследования были синтезированы порошки состава Pr_{1-x} $Ba_xFeO_{3-\delta}$ (где x = 0,4; 0.5; 0,6) и оценен их фазовый состав в восстановительных и окислительных условиях.

Электродные порошки указанного состава получали цитрат-нитратным методом сжигания. Навески нитратов соответствующих металлов растворяли в дистиллированной воде и добавляли лимонную кислоту в соотношение 1:1,2. Раствор постепенно нагревали до испарения воды и самовоспламенения осадка. Полученную золу подвергали температурной обработке при 1000 ˚С (5 ч) и 1100 ˚С (3 ч) с промежуточным помолом в планетарной мельнице (250 об/мин, 1 ч). Керамические образцы состава $Pr_{1-x}Ba_xFeO_{3-\delta}$ получали путем прессования таблеток диаметром 20 мм с использованием гидравлического пресса и высокотемпературного обжига при температуре 1350 °С в течении 5 ч. Относительная плотность всех образцов составила 93 %.

По результатам рентгенофазового анализа (Rigaku Co. Ltd., Japan) было установлено, что порошковые и керамические материалы всех составов демонстрируют кубическую структуру перовскита (пространственная группа Pm3m) без примесей (рисунок 1а). Параметры уточнения элементарной ячейки

методом Ритвельда для образцов состава Pr_{1-x} $Ba_xFeO_{3-\delta}$: a=b=c = 3,9220 Å (для x=0,4); a=b=c = 3,9391 Å (для x=0,5); a=b=c = 3,9469 Å (для x=0,6). Увеличение параметра решетки связано с увеличением содержания бария в А-позиции, так как ионный радиус бария больше ионного радиуса празеодима.

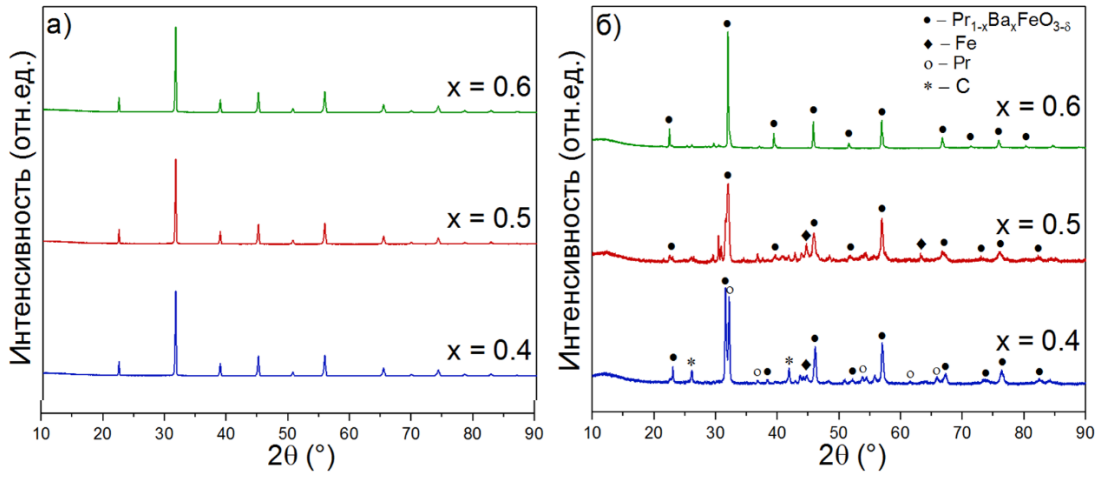


Рис. 1. Дифрактограммы керамических материалов состава $Pr_{1-x}Ba_xFeO_{3-\delta}$ (а) и образцов после восстановительного обжига (б)

Материалы, пригодные для использования в качестве симметричных электродов должны демонстрировать устойчивость как в окислительной, так и в восстановительной атмосферах. Поэтому полученные керамические материалы подвергались обжигу в атмосфере влажного водорода в течении 10 ч при 900 °С. Согласно полученным рентгенограммам (рисунок 1б) все образцы сохраняли кубическую структуру перовскита, однако наблюдалось появление пиков, соответствующих Fe и Pr.

Дальнейшие исследования будут посвящены изучению электротранспортных, термомеханических и электрохимических свойств полученных материалов.

1. Sreedhar, I., Agarwal, B., Goyal, P., & Singh, S. A. (2019). Recent advances in material and performance aspects of solid oxide fuel cells. Journal of Electroanalytical Chemistry, 848, 113315.

ВЫСОКОПРОВОДЯЩИЙ ТВЕРДЫЙ ЭЛЕКТРОЛИТ $(La,Sr)(Ga,Fe,Mg)O_{3-\delta}$: ВЛИЯНИЕ КАТИОНОВ ЖЕЛЕЗА НА СТРУКТУРНЫЕ И ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА

Гордеев Е.В.[1, 2], Осинкин Д.А.[1, 2]
[1)] Институт высокотемпературной электрохимии Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: egorgordeev1998@mail.ru

HIGHLY CONDUCTIVY SOLID-STATE ELECTROLYTE $(La,Sr)(Ga,Fe,Mg)O_{3-\delta}$: INFLUENCE OF IRON CATIONS ON STRUCTURAL AND TRANSPORT PROPERTIES

Gordeev E.V.[1, 2], Osinkin D.A.[1, 2]
[1)] Institute of High Temperature Electrochemistry Ural Division of the Russian Academy of Science, Yekaterinburg, Russia
[2)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Samples of a highly conductive electrolyte based on $(La,Sr)(Ga,Mg,Fe)O_{3-\delta}$ by conventional solid state method were synthesized. Resistivity decreases with an increase in content of iron cations in the sample in air and remains at same level in wet hydrogen (3% H_2O).

В настоящее время в тематике твёрдооксидных топливных элементов активно развиваются исследования симметричных топливных элементов (СТЭ). Последними тенденциями в изучении СТЭ является разработка химического состава высокопроводящего электролита, а одним из перспективных электролитов является галлат лантана допированный стронцием, магнием и железом [1]. В этой работе были исследованы удельные сопротивления электролитов состава $La_{0,8}Sr_{0,2}Ga_{0,8-x}Mg_{0,2}Fe_xO_{3-\delta}$ где x=0,00; 0,05; 0,10; 0,15 и 0,20.

Электролиты были синтезированы классическим твёрдофазным методом. Порошковые прекурсоры в виде $SrCO_3$, La_2O_3, MgO, Ga_2O_3 и Fe_2O_3 отбирали исходя из стехиометрического соотношения синтезируемого состава. После порошки перемешивали с помощью планетарной мельницы в фторопластовом барабане с циркониевыми мельными телами для обеспечения равномерного распределения прекурсоров по всему объёму образца. Полученную смесь порошков обжигали при температуре 1000 °C в течении 6 ч в атмосфере воздуха, а затем снова перемешивали в планетарной мельнице. Из обожжённого порошка получали керамику в виде прямоугольного параллелепипеда с помощью холодного одноосновного прессования с последующим спеканием при температуре 1450 °C в течении 6 ч.

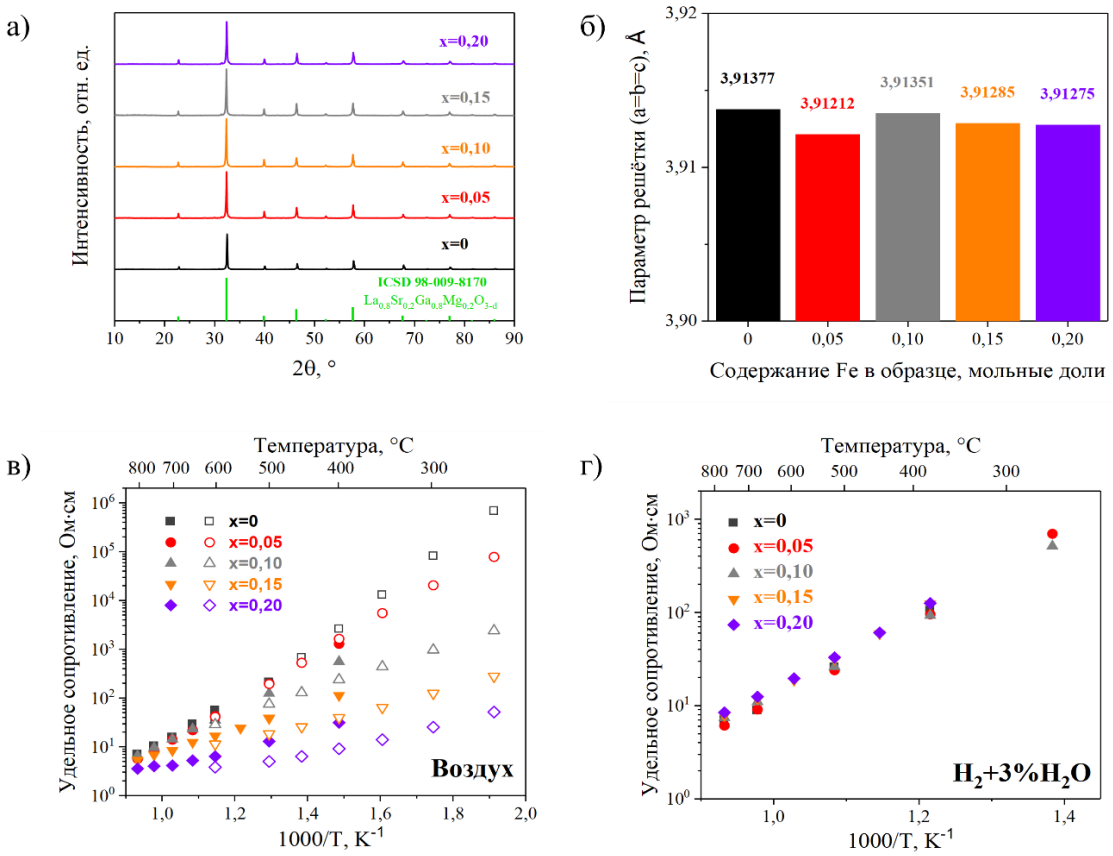


Рис. 1. Характеристики синтезированных образцов, где x – мольная доля катионов железа: (а) дифрактограммы; (б) параметры решётки; удельные сопротивления в различных атмосферах (в) и (г).

Были определены фазовые составы, параметры решётки, а также измерены электропроводности всех образцов при разных температурах в атмосфере воздуха и влажного водорода (3% H_2O).

Все синтезированные образцы имеют заданные химические составы и перовскитную кристаллическую структуру по данным атомно эмиссионной спектрометрии и рентгенофазового анализа, соответственно. Параметр решётки не зависит от содержания катионов железа в электролите и остаётся одном уровне. Удельное сопротивление, измеренное с помощью четырёх зондового метода и импедансной спектроскопией, уменьшается с увеличением содержания катионов железа в электролите в атмосфере воздуха, но при этом практически не изменяется в атмосфере влажного водорода (3% H_2O), что обусловлено различным зарядовым состоянием катиона железа в этих газовых средах.

1. Hanif M. B. et al. Recent progress of perovskite-based electrolyte materials for solid oxide fuel cells and performance optimizing strategies for energy storage applications //Materials Research Bulletin. – 2022. – Т. 146. – С. 111612

PHYSICO-CHEMICAL PROPERTIES OF LANTHANUM COMPOUNDS AS CATHODE MATERIALS FOR SOLID OXIDE FUEL CELLS

Guseva E.M.[1], Kolchugin A.A.[2], Ivanov R.A.[1], Filonova E.A.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russian Federation
[2)] Institute of High-Temperature Electrochemistry, Yekaterinburg, Russian Federation
E-mail: katigusewa@yandex.ru

Calculations of the configurational entropy, fixation factors, crystal structure and electrochemical performance study of the perovskite-type and Ruddlesden-Popper phases on the base of the lanthanum and 3d-transition metal oxides are performed.

The active search for materials for solid oxide fuel cell (SOFC) cathodes involves the tasks of synthesis, phase, structural and electrochemical characterization of promising complex oxides with mixed electron-ion conductivity, such as Ruddlesden-Popper phase $La_2NiO_{4+\delta}$ [1,2] and perovskite $La_{0.6}Sr_{0.4}Co_{0.2}Fe_{0.8}O_{3-\delta}$ [3]. The optimal substitution on A- and B-sublattices using, for example, the medium- and high-entropy doping strategy [4] can be the adequate solution of the problems of chemical and mechanical-thermal compatibility with electrolytes and a high overvoltage at the cathode-electrolyte interface.

The $La_{2-x}Sm_xNiO_{4+\delta}$ (LSNO) and $La_{0.6}Sr_{0.4}Co_{0.2}Fe_{0.7-y}Mn_yNi_{0.1}O_{3-\delta}$ (LSCFMN) samples were synthesized by the citrate-nitrate combustion method. The phase and structure characterization was performed by powder X-ray diffraction in air, the crystal structure parameters were refined by a Rietveld full-profile method. The electrochemical activity of the obtained cathodes was studied using the impedance spectroscopy on the symmetrical cells with a $Ce_{0.8}Sm_{0.2}O_{1.9}$ (SDC) electrolyte.

The configurational entropy calculations for the considered complex oxides have indicated that the LSCFMN series has the values of Sconf in the range of $1.09 \leq S_{conf} \leq 1.30$, LSNO has the values of S_{conf} in the range of $0.32 \leq S_{conf} \leq 0.67$. Thus, LSCFMN can be considered as medium-entropy materials, LSNO as the low-entropy materials. Calculations of the stability factor of the medium-entropy material LSCFMN, have demonstrated, that all LSCFMN oxides satisfied the requirements up to the maximum value of 6 %.

The LSNO samples have a tetragonal structure (I4/mmm); the LSCFMN samples have a rhombohedral structure (R-3c). Concentration dependences of the cell parameters in the LSNO series show that with increasing samarium content a decrease in all calculated parameters was observed, which is explained by the size effect. The cell parameters of LSFMN do not show the obvious correlation with the manganese content. By measuring the electrochemical activity of LSNO with a collector layer on the SDC electrolyte substrate, the polarization resistance R_p values, obtained at 700 °C were 0.954; 0.860 and 1.212 Ω cm^2 for x =0.2; 0.4; 0.6 respectively. However, these values were higher than the R_p value for the base LSCF cathode (0.22 Ω cm^2 at 700 °C),

suggesting that LSNO can be considered as cathodes for intermediate-temperature SOFCs, but further studies are needed to reduce the R_p value.

This work was supported by the Russian Science Foundation (Project № 23-23-00083).

1. Tarutin A.P., Lyagaeva J.G., Medvedev D.A., B, L., Yaremchenko A.A., J. Mater. Chem. A, 9 (1), P. 154-195, (2021)
2. Sadykov VA, Sadovskaya EM, Eremeev NF, et al., Carbon Resources Conversion, 3, P.112-121, (2020)
3. Safian S.D., Abd Malek N.I., Jamil Z., Lee S.-W., Tseng C.-J., Osman N., Int. J. Energy Res., 46 (6), P. 7101-7117, (2022)
4. Pikalova E.Y., Kalinina E.G., Pikalova N.S., Filonova E.A., Materials, 15 (24), 8783, (2022)

CRYSTAL STRUCTURE AND PHASE TRANSITIONS OF THE PEROVSKITE-LIKE RARE-EARTH COMPLEX OXIDES

Ivanova A.S.[1], Ivanov R.A.[1], Filonova E.A.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russian Federation
E-mail: dornlovesuchek30@gmail.com

The high-temperature behavior of the lanthanum and praseodymium complex oxides was established using XRD analysis. The calculations of the configurational entropy and fixation factor of the entropy-stabilized materials were performed.

Solid Oxide Fuel Cells (SOFCs) are a more efficient and environmentally friendly way to produce energy than burning natural fossil fuels [1]. The main problem with existing SOFCs is their high operating temperature range, which results in high operating costs and rapid degradation. Reducing the operating range has led to a reduction in the electrochemical activity of the electrode materials, with the cathode material being the main contributor to the increase in polarization resistance [2]. Therefore, there is a strong need to develop new cathode materials with improved electrochemical performance. Complex oxides with the perovskite structure $La_{0.6}Sr_{0.4}Co_{0.2}Fe_{0.8}O_{3-\delta}$ [3] and the perovskite-like Ruddlesden-Popper structure $Ln_2NiO_{4+\delta}$ (Ln = rare-earth element) [4] are the main candidates for the design of new materials with enhance functional properties. Especially, it is actual with the using of medium- and high-entropy doping strategy [5].

In the present study the synthesis of the $La_{0.6}Sr_{0.4}Co_{0.2}Fe_{0.8-y}Mn_yO_{3-\delta}$ at $0.0 \le y \le 0.8$ (LSCFM), $La_{1.7}Ca_{0.3}Ni_{1-y}Cu_yO_{4+\delta}$ at $0.0 \le y \le 0.4$ (LCNCO), $Pr_{1.6}Ca_{0.4}Ni_{1-y}Cu_yO_{4+\delta}$ at $0.0 \le y \le 0.4$ (PCNCO) samples was carried out by a pyrolysis of organic-salt compositions. The powder samples were heated in air in three stages, with a final annealing temperature of 1000 °C. The powders synthesized were X-ray tested at room temperature and at temperatures up to 1100 °C.

Calculations of the configurational entropy (or S_{mix}) for the studied compounds have shown that the LSCFM series has the values of S_{conf} in the range of $0.8 \le S_{conf} \le 1.05$, LCNCO and PCNCO have the values of S_{conf} in the range of $0.32 \le S_{conf} \le 0.67$. Thus, the LSCFM complex oxides can be considered as medium-entropy materials, the LCNCO and PCNCO complex oxides as the low-entropy oxides. Calculations of the fixation factor of the entropy-stabilized material, δ, have demonstrated, that all LSCFM oxides met the requirements up to the maximum value δ of 6 %.

XRD analysis indicated that the samples obtained were single-phase. Refinement of the crystal structure using a Rietveld full-profile method showed that LSCFM had a rhombohedral structure and was described within space group R-3c, LCNCO had a tetragonal syngony with space group I4/mmm, PCNCO had an orthorhombic structure with space group Bmab. It was found, that the LSCFM solid solutions converged by phase transition with temperature increasing to a cubic structure (Pm3m), and PCNCO

to a tetragonal structure (I4/mmm). No high-temperature phase transition was observed for LCNCO.

This work was supported by the Russian Science Foundation (Project № 23-23-00083).

1. Peng J., Huang J., Wu X.-L., Xu Y.-W., Chen H., Li X./ J. Power Sources, V. 505, P. 230058. (2021)
2. Tahir N.N.M., Baharuddin N.A., Samat A.A., Osman N., Somalu M.R./ J. Alloys Compd., V. 894, 162458.(2022)
3. Jiang, S.P./ Int. J. Hydrogen Energy, V. 44 , P. 7448-7493. (2019)
4. Ding P., Li W., Zhao H., Wu C., Zhao L., Dong B., Wang S./ J.Phys Mater., V.4 (2), P. 022002. (2021)
5. Pikalova, E.Y., Kalinina, E.G., Pikalova, N.S., Filonova, E.A./ Materials, V. 15 , P. 8783. (2022)

КАРБОТЕРМИЧЕСКОЕ ВОССТАНОВЛЕНИЕ ОКСИДА МОЛИБДЕНА(VI) НА ПОВЕРХНОСТИ АКТИВИРОВАННОГО УГЛЯ

Калинина В.В.[1], Конопацкий А.С.[1], Барилюк Д.В.[1], Штанский Д.В.[1]
[1)] Национальный Исследовательский Технологический Университет «МИСиС», г. Москва, Россия
E-mail: vladakalinina98@gmail.com

CARBOTHERMIC REDUCTION OF MOLYBDENUM(VI) OXIDE ON THE SURFACE OF ACTIVATED CARBON

Kalinina V.V.[1], Konopatsky A.S.[1], Bariluyk D.V.[1], Shtansky D.V.[1]
[1)] National University of Science and Technology (MISiS), Moscow, Russia

Two-dimensional 2D materials have attracted wide attention in recent years due to their unique physicochemical properties, such as high specific surface area, electromagnetic properties, etc.

Двумерные (2D) материалы обладают многочисленными преимуществами для применения в различных областях: электроника, катализ, элементы питания и многое другое. Перспективным 2D материалом является дисульфид молибдена (MoS_2). Распространенным методом синтеза MoS_2 является химическое осаждение из газовой фазы (CVD) с использованием в качестве прекурсоров серы и различных соединений молибдена, прежде всего MoO_3. Метод CVD часто используется для осаждения тонких пленок на плоские пластины, однако важной практической задачей является получение MoS_2 на поверхности порошковых подложек, а также подложек с пористой, развитой поверхностью. В настоящей работе исследуются процессы, происходящие с порошком MoO_3 на поверхности активированного угля (АС) во время нагрева.

Порошок MoO_3 наносили на поверхность гранул АС путем ультразвукового диспергирования. Полученный материал отжигали в горизонтальной трубчатой печи в потоке Ar 0,9л/ч при температуре 700 С в течение 20 мин. Исследование структуры материала до и после обработки и его химический состав осуществлялись методами сканирующей электронной микроскопии (СЭМ), энергодисперсионной спектроскопии (ЭДС).

На рисунке 1 показаны СЭМ изображения и результаты ЭДС для одного и того же участка гранулы АС с частицами порошка MoO_3 до и после отжига. До отжига на поверхности АС наблюдаются относительно крупные микрочастицы MoO_3 (до 20 мкм) (рисунок 1.а-в). После отжига вместо крупных оксидных микрочастиц наблюдаются более мелкие отдельные субмикронные частицы (рисунок 1 ж-и). ЭДС анализ показывает, что эти частицы состоят из молибдена и кислорода (рисунок 1 к-м), что указывает на их оксидную природу. Можно предположить, что наблюдаемые частицы являются субоксидами MoO_{3-x}.

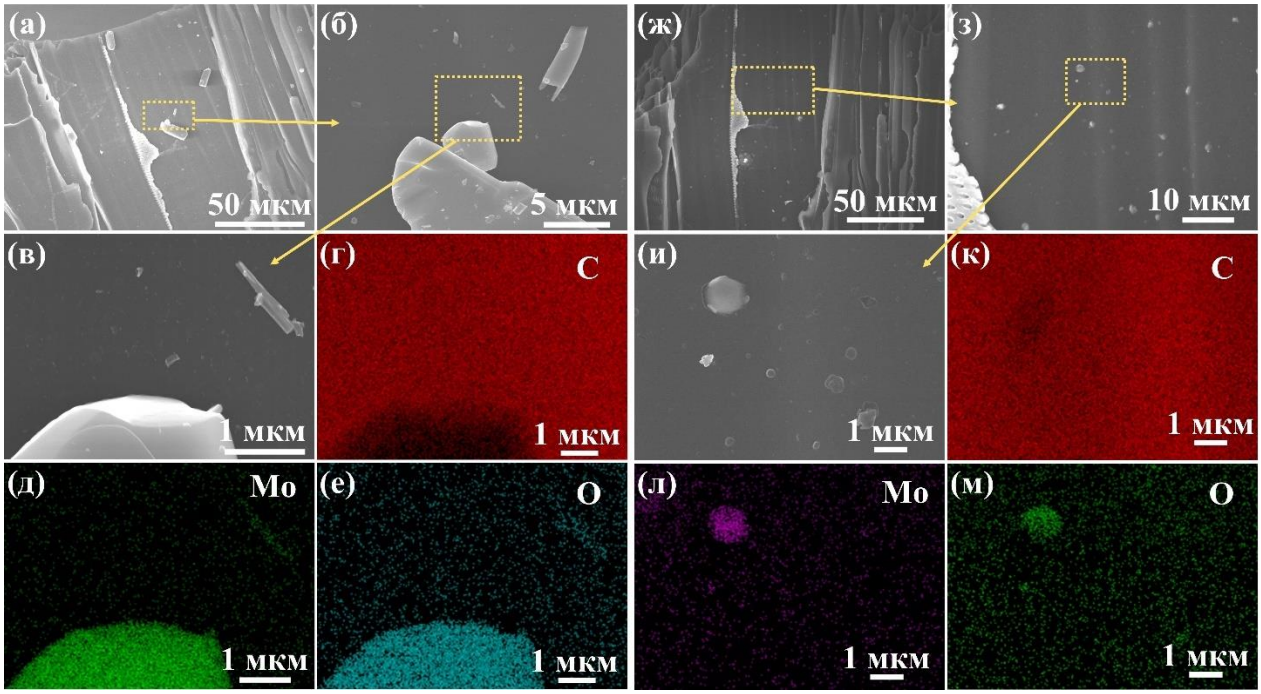


Рис. 1. СЭМ изображения и карты распределения элементов образца MoO_3/АС до отжига – (а-е) и после отжига – (ж-м)

Таким образом, морфология и фазовый состав исходного порошка оксида молибдена, осажденного на гранулы АС, претерпевают значительные изменения при нагревании до подачи серы, что может способствовать образованию структур MoS_2.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (соглашение № 21-49-00039).

1. Li, Z., Meng, X., & Zhang, Z. (2018). Recent development on MoS 2 -based photocatalysis: A review. Journal of Photochemistry and Photobiology C: Photochemistry Reviews, 35, 39–55. doi:10.1016/j.jphotochemrev.2017.12.002

ПОЛУЧЕНИЕ ПОРОШКОВ НА ОСНОВЕ ДИОКСИДА ЦИРКОНИЯ С ДОБАВКАМИ РЗЭ ДЛЯ ИЗУЧЕНИ СВОЙСТВ КЕРАМИКИ

Хорошавцева Н.В.[1], Денисова Э.И.[1], Карташов В.В.[1], Денисова О.В.[1], Меркулов О.В.[2]

[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

[2)] Институт химии твердого тела УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: Natahor98@mail.ru

PRODUCTION OF POWDERS BASED ON ZIRCONIUM DIOXIDE WITH ADDITIVES OF REE FOR ELECTRICALLY CONDUCTING CERAMICS

Khoroshavtseva N.V.[1], Denisova E. I.[1], Kartashov V.V.[1], Denisova O. V.[1], Merkulov O.V[2]

[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

[2)] Institute of Solid State Chemistry of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia

Powders of various compositions based on ZrO2, doped with Y_2O_3 and Sc_2O_3, were obtained for X-ray analysis and measurement of the density, the hardness and electrical conductivity of ceramic samples based on them.

В настоящее время ведутся активные разработки по созданию керамики на основе ZrO_2, легированного оксидами РЗЭ. Основной задачей материаловедения в этой отрасли стоит разработка материалов с высокими электропроводящими свойствами, механической прочностью, химической и высокотемпературной стабильностью.

Данная работа посвящена исследованию старения керамики из ZrO_2 с различным содержанием стабилизирующих добавок Y_2O_3 и Sc_2O_3. Из порошков, полученных аммиачным соосаждением с последующей грануляцией замораживанием, при давлении 245 МПа прессовали образцы-таблетки, которые обжигали в воздушной атмосфере при температуре 1650 ^oC по режиму: нагрев до заданной температуры выдержка в течение 6 часов охлаждение со скоростью нагрева.

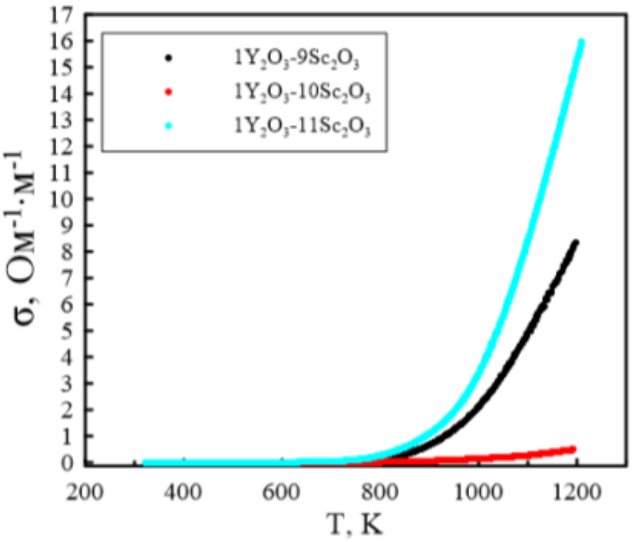


Рис. Температурная зависимость удельной электропроводности после 2000 часов старения

И порошки, и таблетки имели 100 % кубическую структуру. Методом Виккерса определили твердость керамических таблеток. Наибольшей твердостью обладал образец состава ZrO_2-1мол.%Y_2O_3-10мол.%Sc_2O_3, а наименьшей ZrO_2-1мол.%Y_2O_3-11мол.%Sc_2O_3. Электропроводность измеряли образцов двухзондовым методом на переменном токе при частоте 20 кГц в интервале 873-1173 К. После 1000 и 2000 часов старения при 650 ˚С у образцов повторно измеряли электропроводность. В результате обнаружили, что у керамики с 9 и 10 мол.% Sc_2O_3 электропроводность после старения уменьшилось в ~2,6 раз и ~15 раз соответственно. У образца с содержанием 11 мол.% Sc_2O_3 значение электропроводности возросло в ~2 раза. Результаты измерения электропроводности после старения 2000 часов приведены на графике. Плотность образцов в течение старения практически не изменялась. Дальнейшие измерения электропроводности будут проведены после 1000 часов старения при 950 ˚С .

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ГЕТЕРОГЕННЫХ НАНОСТРУКТУРНЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ Ag/MgO/BN

Конопацкий А. С.[1], Калинина В.В.[1], Барилюк Д.В.[1], Штанский Д.В.[1]
[1)] Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС», г. Москва, Россия
E-mail: ankonopatsky@gmail.com

SYNTHESIS AND PROPERTIES OF HETEROSTRUCTURED Ag/MgO/BN CATALYSTS

Konopatsky A.S.[1], Kalinina V.V.[1], Barilyuk D.V.[1], Shtansky D.V.[1]
[1)] National university of Science and Technology «MISIS», Moscow, Russia

Microparticles of hexagonal boron nitride with a trace Mg content were subjected to a high-temperature annealing on air. As the result formation of hexagonal-shaped surface defects decorated by MgO nanoparticles (NPs) occurred. Formation of Ag over the surfaces of the obtained substrate was conducte

Наноматериалы на основе гексагонального нитрида бора (h-BN) являются перспективными носителями для различных металлических (Au, Ag, Pt и др.) наночастиц (НЧ), используемых в гетерогенном катализе [1]. Грани частиц h-BN могут влиять скорость химических реакций, предоставляя новые активные центры для активации молекул, таких как CO и O_2. Кроме того, связи B-OH, образующиеся на дефектах h-BN, позволяют стабилизировать металлические НЧ, что наиболее полно проявляется для наноразмерного порошка h-BN. Вместе с тем легкодоступный и недорогой микропорошок h-BN, лишен этих преимуществ. Поэтому инженерия дефектов и функционализация поверхности экономически привлекательных микроразмерных материалов на основе BN является важным и перспективным научно-техническим подходом.

Микропорошок h-BN с диаметром частиц до 10 мкм и толщиной ~300 нм (далее BNm), был подвергнут отжигу на воздухе в горизонтальной трубчатой печи при температуре 950 °C в течение 3 ч. Полученный порошок был обозначен как BNa. Оба типа порошков были использованы в качестве подложек для осаждения Ag НЧ. Порошок (200 мг) диспергировали в полиэтиленгликоле-400 с помощью погружного сонотрода (Bandelin SONOPULS HD2000, Берлин, Германия) в течение 3 мин. Затем в среду добавляли 100 мг $AgNO_3$ и подвергали УФ-облучению (40 Вт, λ = 253 нм) в течение 20 мин при постоянном перемешивании. После синтеза полученные гетероструктуры многократно промывали в дистиллированной воде и просушивали в вытяжном шкафу. Каталитические свойства полученных материалов изучали в реакции окисления CO (2 мл/мин CO, 4 мл/мин O_2, 30 мл/мин He (VHSV = 21,600 $ч^{-1}$)).

На Рисунке 1 приведены изображения структуры, а также полученные результаты каталитической активности исследованных образцов.

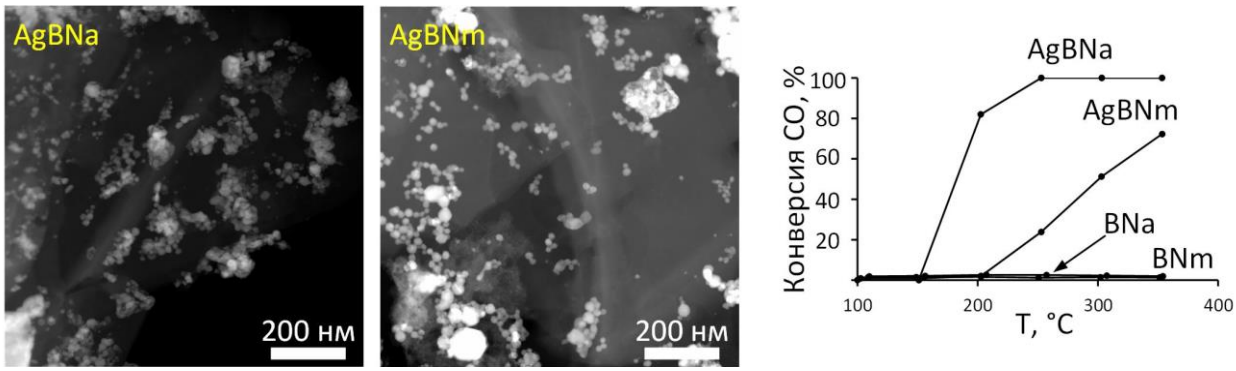


Рис. 1. ПЭМ-изображения структуры образцов AgBNa, AgBNm, а также графики зависимости величины конверсии CO от температуры.

Подложки BNm, BNa не проявляют заметного каталитического эффекта в реакции окисления CO. В то же время, образец AgBNm проявляет выраженный каталитический эффект при температуре начала реакции ~210 °C, а 75% конверсии достигается при 300 °C (T75 = 300 °C). Образец AgBNa, с температурой начала реакции ~150 °C и полной конверсией CO при 250 °C (T100 = 250 °C), обладает наиболее высокой каталитической активностью. Это может быть связано с образованием интерфейсов Ag/MgO, положительное влияние которых на окисление CO было продемонстрировано теоретически и экспериментально ранее [2].

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (соглашение № 20-79-10286).

1. Ringleb, F.; Fujimori, Y.; Brown, M.A.; Kaden, W.E.; Calaza, F.; Kuhlenbeck, H.; Sterrer, M.; Freund, H.-J. The Role of Exposed Silver in CO Oxidation over MgO(0 0 1)/Ag(0 0 1) Thin Films. Catal. Today 2015, 240, 206–213.
2. Ringleb, F.; Fujimori, Y.; Brown, M.A.; Kaden, W.E.; Calaza, F.; Kuhlenbeck, H.; Sterrer, M.; Freund, H.-J. The Role of Exposed Silver in CO Oxidation over MgO(0 0 1)/Ag(0 0 1) Thin Films. Catal. Today 2015, 240, 206–213.

РАЗРАБОТКА ЗАЩИТНОГО ПОКРЫТИЯ ПРОТИВ КАВИТАЦИОННОГО И ЭЛЕКТРОКОРОЗИЙННОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПОРОШКОВОГО ОКРАСА С ДОБАВЛЕНИЕМ УНТ

Коршаков Н.А.[1], Кузин И.В.[2]
[1)] Государственный университет просвещения, г. Москва, Россия
[2)] Северный (Арктический) федеральный университет имени М.В. Ломоносова, г. Архангельск, Россия
E-mail: nikikorsh1998@gmail.com

DEVELOPMENT OF A PROTECTIVE COATING AGAINST CAVITATION AND ELECTRIC CORROSION EXPOSURE USING POWDER PAINT WITH ADDED CNT

Korshakov N.A.[1], Kuzin I.V.[2]
[1)] The State University of Enlightenment, Moscow, Russia
[2)] Northern (Arctic) Federal University named after M. V. Lomonosov, Arkhangelsk, Russia

Cavitation and electric corrosion exposure is poorly studied. Planed to study impact the cavitation and electric corrosion exposure on titanium alloy that coated powder paint with added carbon nanotubes.

Влияние неаддитивности процессов кавитационного и коррозийного разрушения металлов мало изучено [1]. Такому разрушению чаще всего встречается в изделиях, которые работают в условиях гидродинамических нагрузок. Разрушение металлической структуры происходит из-за химического и электрохимического воздействия в среде.

Попытки изготовления лакокрасочных материалов с добавлением УНТ были ранее изучены, но повышение устойчивости конструкций из металла к воздействию кавитацией и электрокоррозии были незначительными и требовали больше трудозатрат для нанесения. Использование порошковой краски позволило добиться наибольших результатов, благодаря свое порошковой структуре, удалось произвести смешивание краски с УНТ с равномерным распределением УНТ в краске использую планетарно шаровую мельницу. Благодаря более высокой адгезии с металлами, полученное покрытие является более прочным и имеет равномерный слой после нанесения. А другим несомненным плюсом являться способ нанесения и скорость получение итогового покрытия. Достаточно нанести краску с УНТ с помощью электростатического распылителя и запечь деталь в печи при 200 градусов Цельсия. После полимеризации и полного остывания полученного покрытия, мы получаем равномерно нанесенный слой краски с повышенными характеристиками устойчивости к кавитационному и электрокоррозийному

воздействию. Нанесение покрытия производилось на титановые пластинки марки ТЛ-5, ввиду своего широко применения в отечественной промышленности, работающих в таких агрессивных средах, как морская вода. Было изготовлено 6 проб порошковой краски с добавление УНТ с процентным соотношение к объему краски – 1.8, 0.9, 0.6, 0.4, 0.1, 0.04. Для исследования покрытия использовался электронный микроскоп Tescan Vega 3. Для оценки устойчивости полученного покрытие выполнялись замеры уноса масс до и после воздействия и рассматривалась структура на электронном микроскопе. Каждая проба краски наносилась на 5 пластинок и на каждую из них в отдельности производилось воздействия кавитацией и электрокоррозией. Для сравнения эффективности покрытия было еще 2 группы пластинок, одна с нанесенной порошковой краской без добавления УНТ и пластинки без нанесения порошковой краски. Все пластинки были отполированы для получения ровного покрытия поверхности.

Полученные результаты выявили что при добавлении УНТ в состав порошковой краски, увеличивается стойкость покрытия к кавитационному и электрокоррозийному воздействию и унос массы сокращается в 2 раза в отличие от пластинок, не покрытых порошковой краской. Наилучшие показатели были достигнуты с использование порошковой краски с добавлением УНТ с соотношением 0.6 %.

1. Кузин И.В., Керимов Р.С., Капустин С.Н. Процессы разрушения поверхности титанового сплава 3М под действием электрокоррозии, Сборник научных трудов Международной конференции «Инновационные технологии и новые материалы: физика, химия, техника и инженерия», 23 - 26 апреля 2019 г., с 93-96
2. Бутырская Е.В., Запрягаев С.А., Нечаева Л.С. Способ получения антикоррозионного лакокрасочного материала, Патент 2662010, 2016 г.

МОДИФИЦИРУЮЩИЕ ДОБАВКИ Al-Cu-Zr ДЛЯ АЛЮМИНИЕВЫХ СПЛАВОВ

Котенков П.В.[1], Попова Э.А.[1], Гилев И.О.[1], Подкин Е.С.[1]
[1)] Институт металлургии УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: p.kotenkoff@yandex.ru

Al-Cu-Zr MODIFYING ADDITIONS FOR ALUMINUM ALLOYS

Kotenkov P.V[1], Popova E.A.[1], Gilev I.O.[1], Podkin E.S.[1]
[1)] Institute of Metallurgy of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russia

The effect of small additions of zirconium and copper on the grain refinement of the Ak7 alloy and its structural components is considered. Additives were introduced both in the form of an experimental Al-Cu-Zr complex ligature and Al-Cu and Al-Zr binary alloys.

Алюминиевые сплавы обладают большой склонностью к образованию крупнозернистой структуры, что приводит к анизотропии свойств, повышенному количеству дефектов, снижению литейных свойств и обрабатываемости сплавов [1, 2]. В связи с этим получение сплавов с мелкозернистой структурой является важной задачей решения данных проблем.

В работе изучено влияние на структуру алюминия, сплава Ак7 состава вводимых лигатурных сплавов и способа их введения. В первом варианте вводили опытную лигатуру Al-36%Cu-9%Zr [3] (здесь и далее в мас.%), во втором бинарные лигатуры Al-30%Cu и Al-2%Zr в таком количестве, чтобы химический состав вводимых в сплав элементов был идентичен составу опытной лигатуры. При использовании бинарных лигатур Al-30%Cu и Al-2%Zr расплав перемешивали и брали пробы (на определение химического состава и проведение металлографического анализа) через промежутки времени: 1, 5, 10, 20, 30 мин. Разливку металла проводили в стальную цилиндрическую изложницу с диаметром 20 мм.

Использование комплексной лигатуры Al-36%Cu-9%Zr, в которой сформировались алюминиды состава $Al_{2.5}Cu_{0.5}Zr$ с кубической решеткой структурного типа L12, привело не только к измельчению зерна α-Al, но и к изменению морфологии алюмокремниевой эвтектики, а именно к переходу ее от пластинчатой формы к глобулярной. Различие в измельчении зерна составило 2-3 порядка величины. Кроме того структура слитка при использовании опытной лигатуры характеризовалась равноосным зерном, тогда как при использовании бинарных лигатур сохранялась столбчатая структура зерна. Алюминиды $Al_{2.5}Cu_{0.5}Zr$ оказывают положительный эффект не только на измельчение зерна α-Al, но и на измельчение алюмокремниевой эвтектики и переход ее от пластинчатой морфологии к глобулярной.

1. P. Li, S. Liu, L. Zhang, X. Liu. Mater. Des., 47 (2013), 522-528.
2. Y. Zhang, S. Ji, Z. Fan. J. Alloys Compd., 710 (2017), 166-171.
3. E. Popova, P. Kotenkov, I. Gilev. Metals, 2022, 12(12), 2067.

МЕТОДИКА ИЗМЕРЕНИЙ МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ ВЕЩЕСТВА В ОТКРЫТОЙ МАГНИТНОЙ ЦЕПИ

Ксенофонтов Д.Г.[1], Костин В.Н.[1], Василенко О.Н.[1]
[1)] Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: ksenofontov@imp.uran.ru

TECHNIQUE FOR MEASURING THE MAGNETIC PROPERTIES OF A SUBSTANCE IN AN OPEN MAGNETIC CIRCUIT

Ksenofontov D.G.[1], Kostin V.N.[1], Vasilenko O.N.[1]
[1)] M.N. Mikheev Institute of Metal Physics of UrB of RAS, Yekaterinburg, Russia

As a result of the theoretical and experimental studies, a technique for measuring the residual magnetic induction of matter in an open magnetic circuit is proposed. The residual magnetic induction can be used to diagnose the structural-phase and stress-strain state of ferromagnetics.

Магнитные свойства ферромагнетиков делятся на свойства тела и свойства вещества [1,2]. Свойства вещества не зависят от формы и размеров ферромагнетика, что делает их более предпочтительными диагностическими параметрами [3].

Остаточная магнитная индукция вещества B_r предлагалась в качестве диагностического параметра для определения структурно-фазового состояния, механических свойств, остаточных и приложенных упругих напряжений, а также величины пластической деформации ферромагнитных материалов и объектов [1,4].

В работе [5] для ферромагнитных тел, отличных по форме от эллипсоида вращения, предложено выражение:

$B_r = \mu_0 (H_e + H_i) / N_{eff} + B_r^t$,

где μ_0 - магнитная постоянная, H_e – внешнее магнитное поле, H_i – внутреннее магнитное поле, B_r^t – измеренная остаточная магнитная индукция тела, N_{eff} - экспериментально определяемый для данного размера и формы образцов коэффициент размагничивания.

Установление границ применимости такого подхода для определения остаточной индукции вещества в открытой магнитной цепи являлось целью настоящей работы.

Измерения магнитных свойств вещества исследуемых образцов выполнялись с использованием комплекса Remagraph C-500 в замкнутой магнитной цепи. В разомкнутой магнитной цепи магнитные свойства вещества образцов определяли путем измерения значений магнитной индукции и внутреннего магнитного поля в одной и той же однородно намагниченной области ферромагнетика.

В результате проведенных теоретических и экспериментальных исследований предложена методика измерения остаточной магнитной индукции вещества в открытой магнитной цепи. Полученные результаты показывают возможность использования остаточной магнитной индукции для диагностики структурно-фазового и напряженно-деформированного состояния ферромагнетиков.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России («Диагностика», номер госрегистрации 122021000030-1)

1. Вонсовский С.В., Шур Я.С. Ферромагнетизм. М. – Л.: ОГИЗ – Гостехиздат. 1948. 816 с.
2. Сандомирский С.Г. Расчет и анализ размагничивающего фактора ферромагнитных тел. Минск: Белорусская наука, 2015. - 244 с.
3. Костин В.Н., Осинцев А.А., Сташков А.Н., Царькова Т.П. Многопараметровые методы структуроскопии стальных изделий с использованием магнитных свойств вещества // Дефектоскопия. 2004. № 3. С. 69-82.
4. Gorkunov E. S., Povolotskaya A. M., Zadvorkin S. M., Putilova E. A. Comparative analysis of the magnetic characteristics of plastically deformed metal in different zones of a welded pipe under elastic deformation // Russian Journal of Nondestructive Testing. 2017. Vol. 53. Issue 9. P. 636–643.
5. Костин В.Н., Василенко О.Н. Локальное измерение индукции коэрцитивного возврата при наличии зазора в составной цепи "преобразователь-объект" // Дефектоскопия. 2012. № 7. С.3-14.

ИССЛЕДОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПОКРЫТИЙ НА ОСНОВЕ СИСТЕМЫ WC-nCo

Куклин И.Э.[1], Барашев Н.Р.[1, 2], Идиятулин А.А.[1], Савельев Д.Д.[1], Коренева Е.А.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Институт химии твердого тела УрО РАН, г. Екатеринбург
E-mail: kuklin.ilya@urfu.ru

INVESTIGATION OF THE FORMATION AND PHYSICO-CHEMICAL CHARACTERISTICS OF COATINGS BASED ON THE WC-nCo SYSTEM

Kuklin I.E.[1], Barashev N.R.[1, 2], Idiyatulin A.A.[1], Savelev D.D.[1], Koreneva E.A.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia
[2)] Institute of solid state chemistry of UB RAS, Yekaterinburg, Russia

This article is devoted to determining the optimal mass ratio of cobalt in the WC-nCo system, which makes it possible to obtain coatings with high adhesion, hardness, corrosion resistance and acceptable resistance to dynamic and thermal loads.

В настоящее время в качестве более дешевой альтернативы деталям, полностью изготовленным из износостойких и коррозионностойких материалов, все чаще применяют функциональные покрытия. Одним из самых перспективных способов обработки поверхности материалов является высокоскоростное газотермическое напыление. С помощью данного метода наносят покрытия из железных, никелевых, медных, алюминиевых, цинковых, вольфрамовых сплавов, баббитовые покрытия подшипников скольжения, электропроводные, электроизоляционные, износостойкие, коррозионностойкие и декоративные покрытия [1]. Особый интерес представляют покрытия из твердого сплава системы WC-nCo наносимые высокоскоростным газотермическим напылением. Такие покрытия обладают высокой твердостью (60-70 HRC), адгезией (>80МПа), жаростойкостью (~550°C), высокой коррозионной стойкостью, повышенной стойкостью к абразивному износу. В зависимости от массового содержания кобальта в системе WC характеристики получаемого покрытия могу изменяться.

В связи с чем целью работы является исследование особенностей формирования и физико-химических характеристики покрытий системы WC-nCo с разным массовым содержанием кобальта.

Для аттестации покрытий были проведены металлографические, дюрометрические и механические исследования. Морфологию и элементный состав определяли с помощью метода растровой электронной микроскопии и

энергодисперсионного анализа. Пористость рассчитывали с использованием микроскопического исследования.

По результатам работы было определено оптимальное массовое соотношение кобальта в системе WC-nCo, которое позволяет получать покрытия с высокой адгезией, твердостью, коррозионной стойкостью и приемлемой стойкость к динамическим и термическим нагрузкам.

1. L. Zhao and E. Lugscheider, Surf. Coat. Technol., 162, 6-10 (2003)

РАДИАЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ В СПЕКТРАХ ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ И КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ α-In_2Se_3

Лобанов А.Д.[1], Сулимов М.А.[1, 2], Корх Ю.В.[1], Патраков Е. И.[1], Радзивончик Д.И.[1], Гавико В.С.[1], Сарычев М.Н.[2], Иванов В.Ю.[2], Кузнецова Т.В.[1, 2]

[1)] Институт физики металлов имени М. Н. Михеева УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
[2)] УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: lobaleks1999@mail.ru

RADIATION EFFECTS IN PHOTOLUMENESCENCE AND RAMAN SPECTRA OF α-In_2Se_3 SINGLE CRYSTALS

Lobanov A. D.[1], Sulimov M.A.[1, 2], Korkh Yu. V.[1], Patrakov E. I.[1], Radzivonchik D. I.[1], Gaviko V. S.[1], Sarychev M.N.[2], Ivanov V.Yu.[2], Kuznetsova T.V.[1, 2]

[1)] M.N. Mikheev Institute of Metal Physics UB RAS, Ekaterinburg, Russia
[2)] Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia

In the work, photolumenescence and Raman spectra, the topology and electrical properties of α-In_2Se_3 single crystals were studied before and after irradiation high-energy electrons (E=10 MeV) with fluences 10^{15} -10^{17} см$^{-2}$.

In_2Se_3 благодаря своим уникальным оптическим и электрическим свойствам нашёл применение в электронике, оптоэлектронике, фотовольтаике [1,2]. In_2Se_3 представлен в различных кристаллических структурах и фазах α, β, γ, δ и к. α-In_2Se_3 является полупроводником с широкой запрещенной зоной 1,3-1,4 эВ [3].

В данной работе исследуются монокристаллы α-In_2Se_3, выращенные вертикальным методом Бриджмана. Методами сканирующей электронной микроскопии (SEM) и атомно-силовой микроскопии (AFM) исследована топология поверхности α-In_2Se_3. На поверхности α-In_2Se_3 обнаружены “капли” размером 200-500 нм. Данные “капли” обладают различными соотношениями индия к селену - 40:60; 36:64; 33:67 ат.%. После облучения электронным флюенсом 10^{17} см$^{-2}$ наблюдается значительное уменьшение количества “капель”. Вероятно, данные “капли” являются аморфными образованиями. Методом токовой спектроскопии (один из методов AFM) обнаружено, что после облучения флюенсом 10^{15} см$^{-2}$ улучшаются проводящие свойства “капель” в отличии от остальной поверхности α-In_2Se_3 и значительно ухудшаются проводящие свойства после облучения электронным флюенсом 10^{17} см$^{-2}$ как и в любой другой точке поверхности α-In_2Se_3. Были исследованы рамановские спектры монокристаллов α-In_2Se_3. Обнаружены пики, соответствующие модам α-In_2Se_3: E^2, A^1_1, E^4, A^2_1, A^3_1. Был обнаружен пик при частоте 148 см$^{-1}$, который вероятно принадлежит к

аморфному $InSe_2$ (In:Se - 33:67 ат.%) [4]. После облучения электронным флюенсом 10^{17} $см^{-2}$ наблюдается смещение частот пиков мод и пики становится более пологими, что говорит об уменьшении степени кристаллизации и деформации кристаллической решётки.

В работе были исследованы спектры фотолюминесценции монокристаллов α-In_2Se_3 при различных температурах от 7 К до 340 К. Обнаружены два пика при температуре 7 К: основной пик при энергии 1,33 эВ (932 нм), второй пик - более широкий при энергии 1,03 эВ (1204 нм). Основной пик при 7 К можно разложить на 4 гауссиана с соответствующими им переходами, которые можно определить как свободный экситон, два связанных экситона и донорно-акцепторный переход. После облучения электронным флюенсом 10^{15} $см^{-2}$ наблюдается уменьшение скорости тушение основного пика и увеличение скорости тушения широкого пика. При дальнейшем облучении электронным флюенсом 10^{17} $см^{-2}$ значительных изменений в спектрах фотолюминесценции не наблюдалось.

Авторы благодарны Бондарю И.В. за предоставленные образцы In_2Se_3.

Работа выполнена с использованием оборудования ЦКП «Испытательный центр нанотехнологий и перспективных материалов» ИФМ УрО РАН.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Программы развития Уральского федерального университета имени первого Президента России Б.Н. Ельцина в соответствии с программой стратегического академического лидерства "Приоритет-2030".

Работа выполнена в рамках Государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «СПИН», No. 122021000036-3).

1. J. Li, H. Li, X. Niu, and Z. Wang. ACS Nano Vol. 15, 12 (2021)
2. A. K. Saha, M. Si, P. D. Ye and S. K. Gupta. Appl. Phys. Lett. 117, 18 (2020)
3. P. Hou, Y. Lv, X. Zhong, and J. Wang. ACS Appl. Nano Mater. 2, 7 (2019)
4. J. Weszka, Ph. Daniel, A. Burian, A.M. Burian, A.T. Nguyen. Journal of Non-Crystalline Solids. 265, 1-2 (2000)

НОВЫЕ КРИТЕРИИ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ СОСТАВОВ СПЛАВОВ СИСТЕМЫ Sc-Co-Al СО СТЕКЛООБРАЗУЮЩЕЙ СПОСОБНОСТЬЮ

Майорова А.В.[1], Куликова Т.В.[1], Коваленко Д.А.[1]
[1)] Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: imeturoran@mail.ru

NEW CRITERIA FOR PREDICTING THE COMPOSITION OF ALLOYS OF THE Sc-Co-Al SYSTEM WITH GLASS-FORMING ABILITY

Maiorova A.V.[1], Kulikova T.V.[1], Kovalenko D.A.[1]
[1)] Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia

Despite decades of intensive research, there are no reliable and physically based methods for predicting the compositions of multicomponent metal alloys with high glass-forming ability. Here, we propose a new model for predicting BMG compositions with approbation on Sc-Co-Al system.

В настоящее время получение объемных металлических сплавов (BMGs) с большим критическим размером (Dmax) связано с проведением многочисленных, трудоёмких и в основном интуитивных исследований по поиску составов.

Нами впервые для системы со стеклообразующей способностью (GFA) Sc-Co-Al рассчитана термодинамическая функция смешения (ΔHmix). Предложена новая модель предсказания составов BMGs сплавов и аморфных лент с апробацией на системах Sc-Co-Al. Новые параметры модели Θ(X-Y)(X), Θ(X-Y)(Y) позволяют прогнозировать область локализации стеклообразующих составов и определяются нахождением минимума произведения параметра PHSS (произведение энтальпии смешения, конфигурационной энтропии и энтропии рассогласования) и геометрического фактора (Г). Подробное описание модели представлено в работе [1]. Следует отметить, что предложенную модель можно использовать для предсказания примерной величины критического диаметра BMGs или получения аморфных лент (Ribbons) стеклообразующих металлических систем в зависимости от локального расположения стеклообразующей области. С помощью разработанных параметров успешно определены составы Sc-Co-Al систем с наилучшей GFA: 1. состав BMGs-Sc52Co26Al20, 2. состав Ribbon– Sc41Co51Al8.

Результаты данной работы открывают перспективы для разработки надежных теоретических методов прогноза новых металлических стекол.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 23-23-00100).

1. A.V. Maiorova, T.V. Kulikova, V.A. Bykov. The formation of glasses in Zr–Cu(Co, Ni)–Al systems: Development of a combined thermodynamics and geometrical model // Intermetallics 152 (2023) 107773

СПЕКТРАЛЬНО-ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА $NaY_{1-x}Tm_xGeO_4$ В ИК ДИАПАЗОНЕ

Меленцова А.А.[1], Липина О.А.[1], Чуфаров А.Ю.[1], Тютюнник А.П.[1], Зубков В.Г.[1]
[1)] Институт химии твердого тела УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: amelentsova@gmail.com

SPECTRAL AND LUMINESCENT PROPERTIES OF $NaY_{1-x}Tm_xGeO_4$ IN IR RANGE

Melentsova A.A.[1], Lipina O.A[1], Chufarov A.Yu.[1], Tyutyunnik A.P.[1], Zubkov V.G.[1]
[1)] Institute of Solid State Chemistry, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russia

A new series of olivine-type $NaY_{1-x}Tm_xGeO_4$ (x = 0.0–0.2), germanates has been prepared. Spectra of luminescence, diffuse reflection, as well as the temperature dependence of the luminescence intensity have been studying.

Данная работа посвящена синтезу и изучению спектрально-люминесцентных свойств в ИК диапазоне новых оптических материалов $NaY_{(1-x)}Tm_xGeO_4$ со структурой оливина. В настоящее время источники ближнего ИК излучения находят применение в различных областях медицины, системах контроля, обнаружения, сопровождения и передачи информации, а также в качестве компонент бесконтактных термометров. Одним из таких источников является оливиновая матрица $NaYGeO_4$ активированная Tm^{3+}.

Серия германатов $NaYGeO_4$:Tm (x = 0.0, 0.025, 0.05, 0.075, 0.1, 0.125, 0.15, 0.175, 0.2) была получена растворным методом с использованием лимонной кислоты в качестве комплексообразователя. Конечные продукты синтеза имели орторомбическую структуру с пространственной группой Pnma (Z = 4).

С помощью спектрофотометра UV-3600 (Shimadsu) был получен спектр диффузного отражения в диапазоне длин волн 200–2000 нм (рис. 1а). Линия поглощения в области 790–815 нм, обусловленная переходом $^3H_6 \rightarrow {}^3H_4$ в ионах Tm^{3+}, свидетельствует о возможности использования в качестве источника возбуждения коммерческого лазера с λ_{ex} = 808 нм. Из полученного спектра с помощью функции Кубелки-Мунка была оценена ширина запрещенной зоны [1], которая оказалась равной ΔE = 5.69 эВ (рис. 1б).

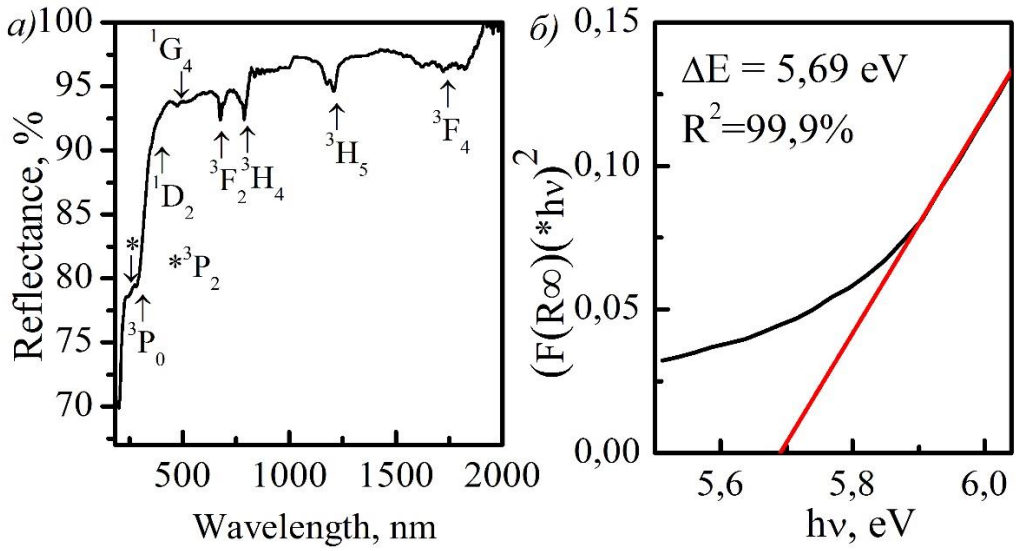


Рис.1 а) Спектр диффузного отражения образца $NaY_{0.98}Tm_{0.02}GeO_4$, б) Графическое определение ширины запрещенной зоны.

Люминесцентные свойства образцов в ИК диапазоне были изучены при возбуждении излучением с λ_{ex} = 808 нм. Широкая полоса в области 1600−2200 нм обусловлена $^3F_4 \rightarrow {}^3H_6$ переходом в Tm^{3+}. Наибольшей интенсивностью эмиссии обладал образец с содержанием Tm^{3+} − 15%, при больших концентрациях активатора наблюдалось концентрационное тушение. Определенная величина постоянной мультипольного взаимодействия (θ = 4.86) указывает на диполь-дипольный тип взаимодействия между ионами.

Для оптимального состава были изучены температурные зависимости интегральной интенсивности и величины FIR = $I_{(1825)}/I_{(1900)}$. Значительного падения интенсивности при повышении температуры до 498 К не наблюдалось. Максимальные значения абсолютной и относительной чувствительностей достигались при комнатной температуре и составили Sa = 0.14 %×K^{-1}, Sr = 0.17 %×K^{-1}. Полученные значения Sa, Sr и энергетический зазор между штарковскими компонентами равный 215 $см^{-1}$, говорит о перспективности использования полученных соединений в качестве оптических компонент низкотемпературных бесконтактных термометров при температурах порядка 75 К.

Работа выполнена в рамках ГЗ ИХТТ УрО РАН тема-АААА-А19-119031890025-9

1. Lipina O.A , Surat L.L, Tyutyunnik A.P , Enyashin A.N, Chufarov A.Yu, Zubkov V.G, Chemical Physics Letters, 667, 9-14 (2017)

ВЛИЯНИЕ ВОДОНАСЫЩЕННОСТИ НА ПРОЧНОСТНЫЕ СВОЙСТВА ГОРНЫХ ПОРОД

Меженов М.Е.[1, 2], Куклина А.А.[1, 2], Зайцев Д.В.[1, 2], Панфилов П.Е.[1]
[1)] Уральский Федеральный Университет, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Уральский Государственный Горный Университет, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: makxsm3121@gmail.com

INFLUENCE OF WATER SATURATION ON THE STRENGTH PROPERTIES OF ROCKS

Mezhenov M.E.[1, 2], Kuklina A.A.[1, 2], Zaytsev D.V.[1, 2], Panfilov P.E.[1]
[1)] Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia
[2)] Ural State Mining University, Ekaterinburg, Russia

The macroscopic deformation behavior of gray granite and rhyolite was studied during bending and uniaxial compression tests in air, in water and after drying in a kiln at a temperature of 150 ^{0}C. The behavior of cracks that appeared after bending on a microscopic scale was also studied.

Одной из проблем, имеющих важное значение для горного дела, является то, как влияет на прочностные свойства горной породы (ГП) контакт с водной средой [1-3]. Поэтому целью настоящей работы было изучение влияния воды на прочностные свойства ГП при сжатии и трехточечном изгибе. В качестве модельных материалов для исследований были использованы серый гранит и риолит. Образцы для испытаний на сжатие и изгиб изготавливали следующим образом: из массивных образцов ГП при помощи отрезного станка вырезались бруски длиной 100мм, шириной 10мм и толщиной 6мм для изгиба, тогда как образцы для испытаний на сжатие имели кубовидную форму с длинами сторон 8x8x13 мм. Для механических испытаний по каждой схеме использовали по 15 образцов: 5 образцов для испытаний на воздухе, 5 образцов для испытаний в водной среде и 5 после выдержки в печи при температуре 150 ^{0}C в течение 40 минут. Развитие трещин в образцах изучали при помощи металлографического и электронного микроскопов. Механические испытания по схеме 3-х точечного изгиба на воздухе, в воде и после сушки проводили при помощи испытательной машины Shimadzu AG-S 2KN (скорость перемещения траверсы 0,1 мм/мин). Испытания по схеме одноосного сжатия проводили при помощи испытательной машины Shimadzu AG-X 50KN. Обработку результатов выполняли с помощью пакета программ Trapezium™.

На основании полученных результатов можно заключить, что тип деформационного поведения горных пород на макроскопическом масштабе определяется уровнем растягивающих напряжений в схеме нагружения и меняется от хрупкого при изгибе до упруго-пластичного при одноосном сжатии.

Влияние водной среды и сушки образцов не приводит к качественным изменениям в деформационном поведении изученных материалов. При этом механические свойства модельных материалов изменялись в зависимости от водонасыщения образцов. При 3-х точечном изгибе и сжатии в воде наблюдается снижение предела прочности и модуля упругости на 15-20%. Тогда как, после высушивания данные характеристики возрастают на 7–13%.

Механизм влияния воды на поведение горных пород можно объяснить в рамках эффекта Ребиндера, а именно пластификации материала в области трещины, где под влиянием атомов внешней среды протекание процессов аккомодации напряжений резко ускоряется, но смены типа деформационного поведения не происходит. Отчасти влияние воды на механические свойства ГП объясняется в рамках эффекта Ребиндера, описывающего механизм пластификации неорганического материала при контакте с атомами внешней среды [4]. Исследование деформационного поведения малогабаритных лабораторных образцов (МГЛО) ГП позволило детально описать процесс аккомодации напряжений на макро- и микро- масштабах, включая развитие трещин. У экспериментов на МГЛО есть недостаток, связанный с тем, что полученные результаты зависят от качества приготовления поверхности образцов. Это существенно для хрупких материалов, к которым относится большинство ГП.

1. Hudson J. A., Harrison J. P. Engineering Rock Mechanics. An Introduction to the Principles, Amsterdam, Pergamon, 2000, 456 p.
2. Haghighatpour P.J., Aliha M.R.M., Assessment of freezing and thawing cycle (FTC) effects on mixed mode I/III fracture toughness and work of fracture of HMA asphalt mixtures, Theoretical and Applied Fracture Mechanics, 2022, Vol. 118
3. Боровков Ю.А., Фурман С.В. Оценка влияния увлажнения и минерального состава горных пород на их прочностные свойства для прогноза возможности прорыва подземных вод в рудник// Горный информационно-аналитический бюллетень. 2007. №1. С.276-280.
4. Ребиндер П.А. Избранные труды. Поверхностные явления в дисперсных системах. Физико-химическая механика. М.: Наука, 1979. С. 203.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕКСТУРЫ МЕТЕОРИТНОЙ БРЕКЧИИ ИЗ ВЕЩЕСТВА ОБЫКНОВЕННЫХ ХОНДРИТОВ ПОСРЕДСТВОМ ТЕРМИЧЕСКИХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

Муфтахетдинова Р.Ф.[1], Яковлев Г.А.[1], Брусницына Е.В.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: gizrozka91@bk.ru

MODELING THE TEXTURE OF METEORITE BRECCIA FROM ORDINARY CHONDRITE MATERIAL BY THERMAL EXPERIMENTS

Muftakhetdinova R. F.[1], Yakovlev G. A.[1], Brusnitsyna E. V.[1]
[1)] Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia

As a result of the work done, a method was developed for modeling the contact heating of a substance of extraterrestrial origin. Further experiments will determine the depth of thermal metamorphism and the heat capacity of the Calama 009 samples meteorite and other ordinary chondrites.

В процессе формирования структуры вещество метеоритов испытывает воздействия различных давлений и температур. Обыкновенные хондриты представляют собой вещество, претерпевшее несколько процессов: аккрецию из газопылевого облака, термический метаморфизм в родительских телах метеоритов и, в большинстве случаев, ударный метаморфизм. Значительный вклад в метаморфизм примитивного вещества вносят температурные воздействия. Моделирование этих воздействий дает возможность получить информацию о процессах, происходящих в космическом пространстве с веществом метеоритов [1, 2].

В настоящей работе в качестве объекта исследования был выбран фрагмент метеорита Calama 009. Силикатная матрица образца состоит из оливина, пироксена и плагиоклаза, в которой встречаются включения диопсида, хромита, троилита и металла. Зерна металла состоят из минералов камасита и тэнита.

Для экспериментов по контактному нагреву, моделирующих образование темной литологии вследствие теплопередачи от расплава, был изготовлен образец из обыкновенного хондрита Calama 009 размером 1 см х 1 см х 3 см, который погружался в расплав, полученный из обломков этого метеорита. Эксперимент производился в печи Таммана при температуре 1400 °С, охлаждение – на воздухе. Образцы были подготовлены по стандартной металлографической методике и тщательно исследованы до и после нагрева с помощью оптической и электронной микроскопии.

Рис. 1. Поверхность спила метеорита Calama 009 после эксперимента по контактному нагреву

После завершения эксперимента по контактному нагреву образец был извлечён из застывшего расплава. Визуально на прежде однородной внешней поверхности образца стало возможно различить три зоны: переплавленная, окисленная и неизменённая. Исследование после распила образца выявило три зоны, аналогичные наблюдаемым в естественных ударенных образцах метеорита Челябинск: серая литология, черная литология, светлая литология. Структура расплавленного вещества стала пористой из-за нагрева в незащищенной среде, на поверхности образовалась оксидная пленка. Однако в погруженном образце после охлаждения и соответствующей пробоподготовки были обнаружены структуры, схожие с нагретым светлым фрагментом образца из обыкновенного хондрита Челябинск. Погружаемая часть приобрела сходство с темной литологией, образованной в естественных космических условиях, а верхняя часть, которая оставалась на воздухе, осталась неизмененной в силу быстрого охлаждения. Под воздействием высоких температур включения троилита и металла в погруженной части образца из фрагмента хондрита Calama были частично расплавлены и растеклись по трещинам, появились прожилки троилита. Также наблюдаются характерные для темной литологии срастания зерен троилита и тэнита. Морфология зерен хромита не изменилась.

Таким образом, выполнение термического эксперимента с веществом метеорита Calama продемонстрировало, что в результате нагрева светлой литологии может быть получено вещество темной литологии. В дальнейших экспериментах планируется серия нагревов вещества образцов со светлой литологией при более температурах.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего РФ в рамках Программы развития УрФУ в соответствии с программой «Приоритет-2030».

1. Danilenko I.A., E. V. Petrova E. V, Zamyatin D. A., and Grokhovsky V. I Chromite crystals in experimentally heated Chelyabinsk LL5 meteorite // 81st Annual Meeting of The Meteoritical Society – 2018 – No. 2067 – p. 6265
2. Grokhovsky V.I., Muftakhetdinova R.F., Yakovlev G.A., Brusnitsyna E.V. & Petrova, E.V. Post-impact metamorphism of the Chelyabinsk meteorite in shock experiment // Planetary and Space Science – 2020– том. 192, 105050.

МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА GdRuSi ДЛЯ МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКОГО СЖИЖЕНИЯ АЗОТА

Мухачев Р.Д.[1], Лукоянов А.В.[1, 2], Кучин А.Г.[1], Платонов С.П.[1]
[1)] Институт физики металлов им. М.Н. Михеева Уральского отделения РАН, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Уральский федеральный университет имени Первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: r.d.mukhachev@imp.uran.ru

MAGNETIC PROPERTIES OF GdRuSi FOR MAGNETOCALORIC LIQUEFACTION OF NITROGEN

Mukhachev R.D.[1], Lukoyanov A.V.[1, 2], Kuchin A.G.[1], Platonov S.P.[1]
[1)] M.N. Mikheev Institute of Metal Physics of Ural Branch of Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russia
[2)] Ural Federal University Named after the First President of Russia B.N. Yeltsin, Ekaterinburg, Russia

The GdRuSi intermetallic compound was investigated both theoretically and experimentally. High values of magnetocaloric characteristics determined for GdRuSi appear in the region of nitrogen liquefaction temperature that makes GdRuSi useful in practice.

Интерметаллические соединения на основе редкоземельных элементов широко исследуются из-за разнообразия возможных применений. Тройное соединение GdRuSi было изучено в рамках теоретического метода DFT+U, учитывающего электронные корреляции для состояний 4f Gd. Теоретический полный магнитный момент GdRuSi оказался образованным исключительно ионом Gd. Его значение очень хорошо согласуется с экспериментальными данными [1]. Для GdRuSi экспериментально было обнаружено большое значение MCE, которое составляет 10.7 при 87 K и 4.94 Дж/кгК при 79 K при изменении поля 0–50 и 0–17 kOe соответственно [1]. Значение 4.94 Дж/кгК несколько меньше 5 Дж/кгК для GdFeSi при изменении поля на 0–17 кЭ [2]. В то же время температура Кюри TC GdFeSi равна 130 K [2] и GdRuSi — 78.3 K, что значительно ниже комнатной температуры для практического применения в магнитном охлаждении. Температура Кюри TC = 78.3 K и, следовательно, максимум -DSM(TC) для GdRuSi ближе к температуре сжижения азота 77.4 K, чем в других соединениях. Поэтому GdRuSi является оптимальным для азотного сжижения. Дальнейший поиск магнитокалорических материалов среди соединений гадолиния может привести к открытию новых экологически-безопасных материалов.

Данное исследование было поддержано грантом Российского научного фонда No 18-72-10098.

1. Kuchin, A.G.; Platonov, S.P.; Mukhachev, R.D.; Lukoyanov, A.V.; Volegov, A.S.; Gaviko, V.S.; Yakovleva, M.Y. Large Magnetic Entropy Change in GdRuSi Optimal for Magnetocaloric Liquefaction of Nitrogen. Metals 2023, 13, 290. https://doi.org/10.3390/met13020290.
2. Kuchin, A.G.; Platonov, S.P.; Gaviko, V.S.; Yakovleva, M.Y. Magnetic and Structural Properties of $GdFe_{1-x}Ti_xSi$. IEEE Magn. Lett. 2019, 10, 2509204. https://doi.org/10.1109/LMAG.2019.2955052.

ПОЛУЧЕНИЕ ТВЕРДЫХ ЭЛЕКТРОЛИТОВ НА ОСНОВЕ ZrO_2 МЕТОДОМ АТМОСФЕРНОГО ПЛАЗМЕННОГО НАПЫЛЕНИЯ

Павлов И.С.[1], Валиев Р.М.[1], Карташов В.В.[1], Куклин И.Э.[1], Барашев Н.Р.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: igorpavlovstudy@gmail.com

SYNTHESIS OF SOLID ELECTROLYTES BASED ON ZrO_2 BY ATMOSPHERIC PLASMA SPRAYING

Pavlov I.S.[1], Valiev R.M.[1], Kartashov V.V.[1], Kyklin I.E.[1], Barashev N.R[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

This article describes the synthesis of a coating based on zirconium dioxide, with a different content of stabilized yttrium oxide, by atmospheric plasma spraying to obtain solid electrolytes. Phase composition, structure, stability and durability depend on the concentration of yttrium oxide

В настоящее время в науке идет бурное развитие технологий по получению твердых электролитов. Интерес к твердым электролитам связан с тем, что эти материалы перспективны в практическом применении в различных электрохимических устройствах – высокотемпературных топливных элементах, сенсорах, электролизерах [1]. В качестве твердых электролитов в ТОТЭ и электрохимических устройствах в основном используются следующие материалы: ZrO_2, CeO_2, $LaGaO_3$ [2,3,4]. С целью практического применения необходимо стабилизировать данные материалы за счет допирования их оксидами щелочноземельных (ЩЗЭ) или редкоземельных элементов (РЗЭ), что способствует образованию кислородных вакансий и, как следствие, появлению значимой кислород-ионной проводимости. На сегодняшний день, наиболее востребованным высокотемпературным электролитом является ZrO_2, стабилизированный оксидом иттрия Y_2O_3 (YSZ), поскольку при температуре свыше 1000С он переходит в тетрагональную структуру, характеризующуюся повышенной твердостью, и демонстрирует максимум ионной проводимости. Синтез твердых электролитов осуществляется следующими методами: твердофазный керамический синтез, синтез под высоким давлением, химическое осаждение, золь-гель метод, распылительная сушка и плазменное наыпление [5]. Среди данных методов синтеза наиболее перспективным является плазменное напыление. Структура, полученная при помощи данного метода способствует увеличению срока службы покрытия.

В данной работе рассматривается нанесение методом атмосферного плазменного напыления покрытий на основе ZrO_2 с различным содержанием стабилизирующих добавок Y_2O_3 для синтеза твердых электролитов. Целью

работы является определение влияния содержания Y_2O_3 и крупности порошка на структуру и свойства полученных твердых электролитов.

В качестве исходного материала использованы порошки ЦИ15 (15% Y_2O_3 и 85% ZrO_2, крупностью 100 – 160 мкм), ЦИ11,5 (11,5% Y_2O_3 и 88,5% ZrO_2, крупностью 160 – 200 мкм), Z7Y (7% Y_2O_3 и 93% ZrO_2, крупностью 40 – 63 мкм). Синтез покрытий проводился методом атмосферного плазменного напыления с использованием плазмотрона постоянного тока. Подача порошка осуществлялась как за анодное пятно, так и под срез сопла плазматрона. В роли плазмообразующего газа использовали азотно-аргоновую смесь. Нанесение покрытий проводилось при различных технологических параметрах напыления.

Для аттестации твердых электролитов, определения состава и морфологии покрытий применяли методы РЭМ и РФА. Микротвердость исследуемых образцов определяли с помощью цифрового микртовердомера по методу Виккерс, в качестве индентора использовалась четырехгранная алмазная пирамида. Макроскопическое исследование проводилось для расчета пористости.

По результатам исследований установлено, что фазовый состав, структура и, как следствие, свойства, стабильность и долговечность напыленных покрытий зависят от концентрации стабилизирующих добавок оксида иттрия.

1. Furukawa, S., Masui, T., & Imanaka, N. (2008). New environment-friendly yellow pigments based on CeO_2–ZrO_2 solid solutions. Journal of alloys and compounds, 451(1-2), 640-643
2. Choi, Y.-H., Lee, S.-H., Wackerl, J., Jung, D.-H., Suhr, D.-S., Choi, S.-Y., & Peck, D.-H. (2012). Fabrication of scandia-stabilized zirconia electrolyte with a porous and dense composite layer for solid oxide fuel cells. Ceramics International, 38, S485–S488
3. Mondal, P. (1999). Enhanced specific grain boundary conductivity in nanocrystalline Y2O3-stabilized zirconia. Solid State Ionics, 118(3-4), 331–339.
4. Serena, S., Sainz, M. A., De Aza, S., & Caballero, A. (2005). Thermodynamic assessment of the system ZrO_2–CaO–MgO using new experimental results: Calculation of the isoplethal section MgO CaO–ZrO_2. Journal of the European ceramic Society, 25(5), 681-693
5. Chandrasekhar, V. (1999). Polymer solid electrolytes: synthesis and structure. Blockcopolymers-Polyelectrolytes-Biodegradation, 139-205

ПРОЧНОСТНЫЕ СВОЙСТВА ВОЛЬФРАМА, ПОДВЕРГНУТОГО ИНТЕНСИВНЫМ ДЕФОРМАЦИЯМ ПОД ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ

Перескокова К.И.[1, 3], Пилюгин В.П.[2], Поставалова К.А.[2], Куклина А.А.[3], Зайцев Д.В.[1, 3], Панфилов П.Е.[3]
[1)] Уральский государственный горный университет, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Институт физики металлов УрО РАН им. М.Н. Михеева, г. Екатеринбург, Россия
[3)] Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: zaytsev@m.ursmu.ru

THE STRENGTH PROPERTIES OF TUNGSTEN SUBJECTED TO INTENSE DEFORMATION UNDER HIGH PRESSURE

Pereskokova K.I.[1, 3], Pilugin V.P.[2], Postavalova K.A.[2], Kuklina A.A.[3], Zaytsev D.V.[1, 3], Panfilov P.E.[3]
[1)] Ural State Mining University, Yekaterinburg, Russia
[2)] M.N. Mikheev Institute of Metal Physics of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia
[3)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The tungsten investigated during three-point bending and shear tests. The microhardness studies carried out before and after pressure shear. It studied with using a scanning electron microscope. The fragile behavior of samples observed and the microhardness increased during intense deformation.

Вольфрам является одним из наиболее тяжёлых, твёрдых и самых тугоплавких металлов с уникальным набором механических и физических свойств. Благодаря своим высоким характеристикам, вольфрам имеет достаточно широкий спектр применимости. Он является основой твердых и многих жаропрочных сплавов, входит в состав износоустойчивых сплавов и инструментальных сталей. Также вольфрам, предположительно, является одним из наиболее вероятных кандидатов в качестве материала, который будет использоваться в будущих термоядерных реакторах [1,2]. Целью данного исследования было изучение прочностных свойств монокристаллического вольфрама в исходном состоянии и после воздействия интенсивной пластической деформации.

Для исследования были изготовлены образцы из монокристаллического стержня вольфрама, полученного методом электро-лучевого переплав с помощью прецизионного 2-х осевого электроэрозионного проволочно-вырезного станка АРТА 123 ПРО. Механические испытания проводились при комнатной температуре после проведения полировки и травления. Испытания по схемам 3-х точечного изгиба и сдвига проводили на испытательной двухколонных машинах AGS-2kNX и AGX-50kN, соответственно. Обработку полученных данных: построение деформационных кривых и определение

основных механических характеристик, проводили при помощи программ Trapezium ™. Также образцы вольфрама подвергались сдвигу под давлением 10Гпа и температуре 300°С на углы: 45°, 90°, 180° и 360°. Микроструктуру и трещины в лабораторных образцах изучали на электронном сканирующем микроскопе VEGA LMS (TESCAN). Микроиндентирование по Виккерсу проводили на ПМТ-3.

Была проведена аттестации микроструктуры исходных образцов после отреза. На поверхности наблюдались оплавленные частицы и трещины, образующие сетчатую структуру с прямоугольными элементами. Появление трещин вызвано термоударом при резке образца. Глубина трещин небольшая и при условии предварительной механической полировки образцов, их можно не учитывать.

Разрушение при трехточечном изгибе происходило в области максимального напряжения – линии приложения нагрузки. Трещин на поверхности не наблюдается. Испытания на срез проводились одновременно по двум плоскостям. Разрушения протекали по одной из плоскостей в области линии нагружения. В данном случае видны трещины, начинающиеся от края образца (рисунок 1). Трещины растут не характерным для хрупких материалов способом: наблюдаются мосты, искривления трещины и сателлитые трещины перед вершиной основной трещины. Поверхности лабораторных образцов при изгибе и срезе демонстрируют хрупкое поведение.

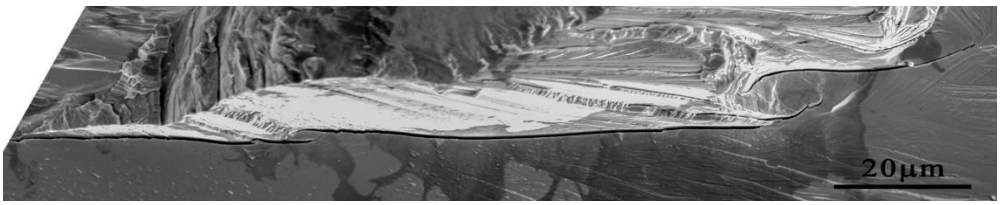


Рис. 1. – Вершина трещины в образце при срезе

Измерение микротвердости исходного образца и образцов после сдвига под давлением показало, что наблюдается её небольшое увеличение под действием деформации от 5,4 ГПа до 7,6 ГПа. Отклонение от равномерного увеличения твердости у образца, повернутого на 180°, возможно связано с проскальзыванием образца. Появление дефектов около отпечатка не наблюдается.

1. Воронин А.В., Семенов Б.Н., Судьенков Ю.В. Механизм разрушения вольфрама в результате тепловой нагрузки при воздействии плазменной струи // Вестник СПбГУ. Математика. Механика. Астрономия, vol. 2, no. 1, 2015, pp. 106-111.
2. Wang H., Xie Z.M., Zhang L.C., Han L and etc. Damage behaviors in microstructures and mechanical properties of pure tungsten induced by repetitive thermal loads // Journal of Nuclear Materials, Volume 559, 2022. https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2021.153433.

ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ СИНТЕЗА НА МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ПЕРОВСКИТОВ НА ОСНОВЕ МАНГАНИТА ЛАНТАНА, ДОПИРОВАННОГО ИОНАМИ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ (Li-Cs)

Пермякова А.Е.[1], Русских О.В.[1], Остроушко А.А.[1]
[1)] Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: nastia2605permiakova@yandex.ru

EFFECT OF SYNTHESIS CONDITIONS ON THE MAGNETIC PROPERTIES OF PEROVSKITES BASED ON LANTHANUM MANGANITE DOPED WITH ALKALI METAL IONS (Li-Cs)

Permiakova A.E.[1], Russkih O.V.[1], Ostroushko A.A.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Complex oxides with perovskite structure $La_{0.9}M_{0.1}MnO_{3\pm y}$ (M = Li, Na, K, Rb, Cs) were synthesized by pyrolysis of polymer-salt compositions. Magnetization studies were performed to check the impact of the alkali ion dopants as well as synthesis conditions.

Перовскитоподобные сложные оксиды находят применение в разных областях техники. Повышенный интерес в последние годы к перовскитам РЗЭ, допированным ионами щелочных металлов, вызвало открытие эффекта колоссального магнетосопротивления. Исследование таких систем позволило объяснить эффект колоссального магнетосопротивления совместным присутствием ионов марганца в степенях окисления +3 и +4, что ведет к возникновению кинетического ферромагнитного обмена $Mn^{4+}–O–Mn^{3+}$. Такой механизм ответственен и за ферромагнитный порядок в манганитах, включающих ионы со смешанной валентностью. Кроме того, недопированный манганит лантана при температурах ниже температуры Кюри является антиферромагнетиком, при формировании антиферромагнетизма в этом случае играют роль кооперативные JT-искажения. При замещении лантана на ионы щелочных металлов кооперативный JT-эффект разрушается, и манганит становится ферромагнитным. Учитывая все вышеперечисленное, было проведено исследование соединений на основе манганита лантана, допированного ионами щелочных металлов для установления влияния типа щелочного металла в составе соединения и условий синтеза на магнитные свойства образцов.

Образцы $La_{0.9}M_{0.1}MnO_{3\pm y}$ (M=Li-Cs) были получены в реакциях горения полимерно-солевых прекурсоров, являющихся водными растворами нитратов металлов и органического компонента, в качестве которого использовали поливиниловый спирт или поливинилпирролидон. Количество полимерного компонента было рассчитано по реакции взаимодействия с нитрат-ионами с образованием азота, воды и углекислого газа. Для изучения влияния условий

синтеза на магнитные свойства были приготовлены прекурсоры, содержащие стехиометрическое количество полимерного компонента по реакции горения, а также его двукратный или четырехкратный избыток.

Фазовый состав определяли методом рентгеновской порошковой дифракции (Bruker D8 ADVANCE, CuKa), проводили расчет параметров элементарной ячейки (пр.гр. R-3c), морфологию изучали при помощи электронного микроскопа AURIGA CrossBeam (Carl Zeiss NTS), удельную поверхность – анализатора TRISTAR 3020 (Micromeritics), гистерезисные магнитные свойства и магниторезистивный эффект – вибрационного магнитометра с опцией измерения магнитосопротивления LakeShore VSM 7407.

Полученные соединения продемонстрировали сложное магнитное поведение, вызванное конкурирующими ферромагнитными и антиферромагнитными составляющими, соотношение которых определялось активностью окислительных процессов, происходящих во время подготовки образца, размером и морфологией кристаллитов, что в значительной степени определялось составом исходного прекурсора. Намагниченность насыщения для натрийсодержащего образца была выше, чем в работе [1] у образца такого же состава, полученного другим методом. Следует отметить, что возможность управления магнитными свойствами соединений повышает привлекательность использования изученных манганитов в различных технологических приложениях.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ № 22-23-00718.

1. Głuchowski, P. Nikonkov, R. Tomala, R. Stręk, W. Shulha, T. Serdechnova, M. Zheludkevich, M. Pakalaniškis, A. Skaudžius, R. Kareiva, A. Abramov, A. Kholkin, A. Bushinsky, M.V. Karpinsky, D. Magnetic Properties of $La_{0.9}A_{0.1}MnO_3$ (A: Li, Na, K) Nanopowders and Nanoceramics. Materials 2020, 13, 1788. https://doi.org/10.3390/ma13071788

ОПТИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ИНФРАКРАСНОЙ ОПТИКИ НА ОСНОВЕ СИСТЕМ $AgCl_{0.25}Br_{0.75} – TlCl_{0.74}Br_{0.26}$ И $AgCl_{0.25}Br_{0.75} – TlBr_{0.46}I_{0.54}$

Пестерева П.В.[1], Жукова Л.В.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина
E-mail: p.v.pestereva@urfu.ru

OPTICAL MATERIALS FOR INFRARED OPTICS BASED ON THE $AgCl_{0.25}Br_{0.75} – TlCl_{0.74}Br_{0.26}$ AND $AgCl_{0.25}Br_{0.75} – TlBr_{0.46}I_{0.54}$ SYSTEMS

Pestereva P. V.[1], Zhukova L.V.[1]
[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin

In this work, the phase diagrams of the $AgCl_{0.25}Br_{0.75} – TlCl_{0.74}Br_{0.26}$ and $AgCl_{0.25}Br_{0.75} – TlBr_{0.46}I_{0.54}$ systems was studied by differential thermal and X-ray diffraction analysis methods. A number of single crystals and optical ceramics within every systems has been synthesized.

Для развития инфракрасной оптики требуется разработка материалов, обладающих высокими функциональными свойствами. Кристаллы и керамика на основе галогенидов серебра и таллия (I) обладают широким спектром пропускания от 0.4 до 60.0 мкм без окон поглощения в зависимости от системы и состава, негигроскопичностью, устойчивостью к УФ-излучению и радиационному облучению, пластичностью, что позволяет изготавливать на их основе оптические волокна [1]. За счет высоких функциональных свойств кристаллы и оптическая керамика на основе галогенидов серебра и таллия (I) являются перспективными материалами для инфракрасной оптики и фотоники.

С целью разработки новых оптических материалов, обладающих всеми перечисленными ранее свойствами, проведено исследование фазовых диаграмм систем $TlBr_{0.46}I_{0.54} – AgCl_{0.25}Br_{0.75}$ и $TlCl_{0.74}Br_{0.26} – AgCl_{0.25}Br_{0.75}$ и синтез твердых растворов на их основе. Также были определены режимы синтеза шихты, выращены монокристаллы и получена оптическая керамика на их основе.

Для реализации исследования фазовых диаграмм систем $AgCl_{0.25}Br_{0.75} – TlBr_{0.46}I_{0.54}$ и $AgCl_{0.25}Br_{0.75} – TlCl_{0.74}Br_{0.26}$ применялись методы дифференциально-термического (ДТА) и рентгенофазового анализов (РФА) [1]. Синтез шихты проводился по методу термозонной кристаллизации-синтеза (ТЗКС), выращивание монокристаллов проводилось по методу Бриджмена, а синтез оптической керамики – по методу направленной кристаллизации [2].

Согласно результатам ДТА и РФА анализов, фазовые диаграммы систем $AgCl_{0.25}Br_{0.75} – TlBr_{0.46}I_{0.54}$ и $AgCl_{0.25}Br_{0.75} – TlCl_{0.74}Br_{0.26}$ характеризуются неограниченной растворимостью в жидком состоянии и ограниченной

растворимостью в твердом состоянии. В каждой из диаграмм наблюдается наличие двух областей гомогенности в близи каждого из индивидуальных твердых растворов ($AgCl_{0.25}Br_{0.75}$, $TlBr_{0.46}I_{0.54}$, $TlCl_{0.74}Br_{0.26}$). Для системы $AgCl_{0.25}Br_{0.75}$ – $TlBr_{0.46}I_{0.54}$ однофазные твердые растворы возможно получить в областях от 0 до 15 мол. % и от 92 до 100 мол. % $TlBr_{0.46}I_{0.54}$ в $AgCl_{0.25}Br_{0.75}$, а двухфазные – от 15 до 36 мол. % и от 69 до 92 мол. % $TlBr_{0.46}I_{0.54}$ в $AgCl_{0.25}Br_{0.75}$. В случае системы $AgCl_{0.25}Br_{0.75}$ – $TlCl_{0.74}Br_{0.26}$ области гомогенности наблюдаются при 0-7 мол. % и при 95–100 мол. % $TlCl_{0.74}Br_{0.26}$ в $AgCl_{0.25}Br_{0.75}$, а области гетерогенности – при 7–95 мол. % $TlCl_{0.74}Br_{0.26}$ в $AgCl_{0.25}Br_{0.75}$. В каждой из областей получена высокочистая шихта, выращены монокристаллы и синтезирована оптическая керамика.

Разработанные материалы обладают широким спектром пропускания и подходят для изготовления различных оптических изделий, включая ИК волоконную оптику. Полученные монокристаллы и оптическая керамика имеют высокие перспективы внедрения в существующие широкоспектральные приборы, ИК волоконные системы, а также оптику и фотонику широкого назначения.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-73-10108, https://rscf.ru/project/21-73-10108/.

1. Жукова, Л. В., Корсаков, А. С., & Салимгареев, Д. Д. ИНФРАКРАСНЫЕ КРИСТАЛЛЫ. ТЕОРИЯ И ПРАКТИКА: учебное пособие. ООО "Издательство УМЦ УПИ", (2015).
2. Salimgareev, D., Zhukova, L., Yuzhakova, A., Lvov, A., & Korsakov, A. Synthesis of the AgBr – AgI system optical crystals. Optical Materials, 114, 110903,(2021)

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ СВОЙСТВ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ КАРБИДОВ С ПРИМЕНЕНИЕМ ПОТЕНЦИАЛА МЕЖАТОМНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА ОСНОВЕ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

Пикалова Н.С.[1], Балякин И.А.[1], Юрьев А.А.[1], Ремпель А.А.[1]
[1)] Институт металлургии УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: s.publicinus@mail.ru

PREDICTING THE PROPERTIES OF HIGH-ENTROPY CARBIDES WITH THE INTERATOMIC POTENTIAL BASED ON NEURAL NETWORKS

Pikalova N.S.[1], Balyakin I.A.[1], Yuriev A.A.[1], Rempel A.A.[1]
[1)] Institute of Metallurgy, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia

Structural and mechanical properties of six-component high-entropy carbide (TiZrHfNbTa)C were studied with the interatomic potential based on neural networks.

При компьютерном моделировании высокоэнтропийных сплавов (ВЭС) из-за их многокомпонентности возникают следующие проблемы: необходимость использования больших сверхъячеек приводит к существенному увеличению времени ab initio расчетов, а необходимость учета особенностей взаимодействия между большим количеством типов атомов затрудняет использование традиционных потенциалов межатомного взаимодействия.

В данной работе исследовались свойства шестикомпонентного высокоэнтропийного карбида $(Ti_{0.2}Zr_{0.2}Hf_{0.2}Nb_{0.2}Ta_{0.2})C$, имеющего структуру типа B1, состоящего из двух подрешеток – металлической и углеродной. Использовался потенциал машинного обучения в форме искусственных нейронных сетей (ИНС), полученный с помощью программы DeePMD[1]. Металлическая подрешетка высокоэнтропийного карбида, состоящая из 256 атомов, создавалась с использованием специальных квазислучайных структур (SQS)[2], сгенерированных в программе ATAT[3], для имитации бесконечного неупорядоченного твёрдого раствора. Полученная структура расширялась до состоящей из 512 атомов, путем добавления углеродной подрешетки.

Для ab initio расчетов электронной структуры ВЭС использовался программный пакет VASP[4]. Была исследована неопределенность энергии системы в зависимости от всевозможных 5! = 120 перестановок типов атомов в металлической подрешетке. Показано, что энергия рассматриваемой системы малочувствительна к атомной конфигурации, и для исследования свойств карбида можно использовать любое из его начальных состояний.

Качество полученного ИНС-потенциала оценивалось с помощью среднеквадратичных отклонений для энергий, сил и вириалов, рассчитанных с

помощью данного потенциала, по сравнению с результатами ab initio расчетов. Среднеквадратическое отклонение (x, y, z)-компонент сил составляет 103 мэВ/Å, а значит, полученный потенциал хорошо воспроизводит ab initio данные.

С использованием полученного потенциала методом классической молекулярной динамики в программном пакете LAMMPS[5] исследовались структурные характеристики модели указанного сплава, состоящей из 4096 атомов, при давлениях от 1 до $5 \cdot 10^5$ атм. Было проведено моделирование одноосного растяжения ячейки, ориентированной в направлении <100>, и определены механические свойства моделируемого карбида: коэффициенты упругости, модуль всестороннего сжатия, модуль упругости, коэффициент Пуассона. Полученные значения хорошо согласуются с экспериментальными и расчетными данными из литературы, что говорит о хорошей предсказательной способности сгенерированного потенциала.

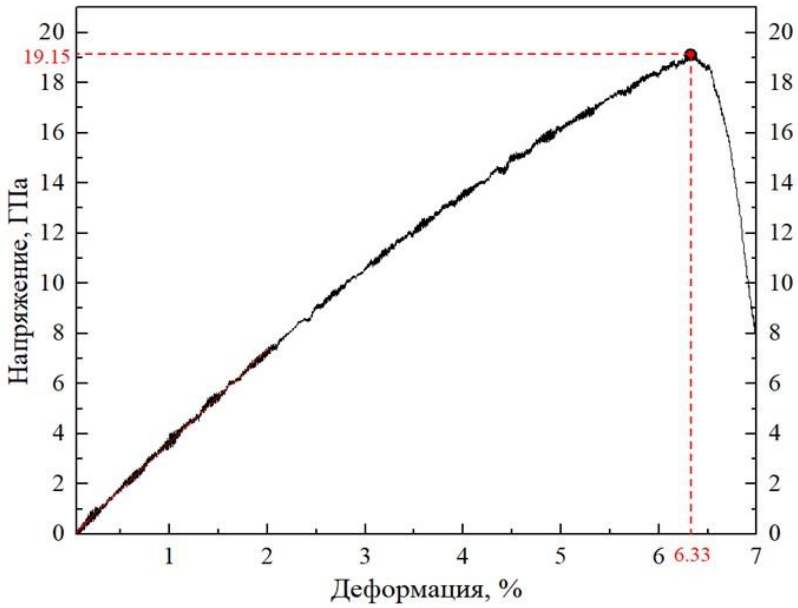


Рис. 1. Зависимость напряжения от деформации ячейки моделирования

1. Han Wang, Linfeng Zhang, Jiequn Han, and Weinan E. DeePMD-kit: A deep learning package for many-body potential energy representation and molecular dynamics, Computer Physics Communications, V. 228, P. 178-184, (2018).
2. Gao M.C., Niu C., Jiang C., Irving D.L. Applications of Special Quasi-random Structures to High-Entropy Alloys, High-Entropy Alloy. Fundam. Appl. Springer, Cham, P. 333–368, (2016).
3. van de Walle A., Asta M., Ceder G. The Alloy Theoretic Automated Toolkit: A User Guide, Calphad Comput. Coupling Phase Diagrams Thermochem, V. 26, № 4, P. 539–553, (2002).

4. Kresse G., Furthmüller J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set, Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys, V. 54, № 16, P. 11169–11186, (1996).
5. Thompson A.P., Aktulga H.M., Berger R., Bolintineanu D.S., Brown W.M., Crozier P.S., in 't Veld P.J., Kohlmeyer A., Moore S.G., Nguyen T.D., Shan R., Stevens M.J., Tranchida J., Trott C., Plimpton S.J. LAMMPS - a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales, Comput. Phys. Commun. North-Holland, V. 271, P. 108171, (2022).

КИНЕТИКА АТОМНОГО УПОРЯДОЧЕНИЯ В НЕСТЕХИОМЕТРИЧЕСКОМ СПЛАВЕ Cu-56AT.%Au

Подгорбунская П.О.[1, 2], Новикова О.С.[1], Глухов А.В.[1], Кругликов Н.А.[1], Волков А.Ю.[1]

[1)] Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения РАН, г. Екатеринбург, Россия

[2)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: polina.podgorbunskaya@yandex.ru

KINETICS OF ATOMIC ORDERING IN A NONSTOICHIOMETRIC Cu-56AT.%Au ALLOY

Podgorbunskaya P.O.[1, 2], Novikova O.S.[1], Glukhov A.V.[1], Kruglikov N.A.[1], Volkov A.Yu.[1]

[1)] Institute of Physics of Metals named after M.N. Mikheev, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia

[2)] Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin, Ekaterinburg, Russia

The kinetics of the disorder→order (A1→L1o) phase transformation in a nonstoichiometric Cu-56at.%Au alloy in the temperature range 200-350 °C has been studied.

Формирование атомного дальнего порядка было впервые обнаружено более 100 лет назад при изучении медно-золотых сплавов. В дальнейшем это явление неоднократно и подробно исследовалось с применением самых разнообразных методик и на различных системах [1]. В то же время, в современных работах часто обращается внимание на тот факт, что многие экспериментальные результаты получены достаточно давно и многократно процитированы, но в настоящее время их достоверность вызывает сомнения. Целью данной работы является изучение кинетики превращения беспорядок→порядок (A1-L1o) в нестехиометрическом сплаве Cu-56Au (ат.%).

В работе исследовали сплав золото-медь, содержащий 56 ат.% золота (или 80 масс.% Au). Слиток диаметром 5 мм гомогенизировали при температуре 850°C в течение 3 часов, закаливали путем охлаждения в воде и разрезали на две части. Из одной части слитка методом волочения была получена тонкая проволока диаметром 0,25 мм для резистометрии. Другая часть слитка была прокатана до получения пластин толщиной 0,3 мм (для аттестации фазового состава и измерения микротвердости) и фольг толщиной 0,1 мм (для изучения микроструктуры методом просвечивающей электронной микроскопии). Исследование проводилось на образцах, разупорядоченное состояние в которых было получено двумя путями: деформацией со степенью 75% и закалкой от температуры 600 °C после отжига в течение 1 часа.

В работе впервые проведено подробное исследование кинетики атомного упорядочения нестехиометрического сплава Cu-56Au в ходе длительных отжигов (от 1 часа до 4-х месяцев) в температурном интервале 200-350 °C. Установлено, что в закаленном сплаве скорость превращения беспорядок→порядок значительно выше. Тем не менее, требуется 2 месяца выдержки при температуре 250°C для формирования хорошо упорядоченного по типу L1o состояния в исследуемом сплаве [2]. В полученном структурном состоянии удельное электросопротивление сплава Cu-56Au составляет: ρ=7.04·10-8 Ом м, что значительно ниже известных результатов [1]. Отсюда можно сделать вывод, что общепринятая концентрационная зависимость электросопротивления требует уточнения. Выявлено, что микротвердость образцов сплава немонотонно изменяется в ходе атомного упорядочения: на начальных этапах отжига микротвердость растет, достигает максимума, а затем начинает снижаться. Положение максимума микротвердости у деформированного и закаленного образцов приблизительно соответствует такой продолжительности отжига, при которой в них образуется приблизительно 50-60% новой фазы. По результатам рентгеновской дифрактометрии установлено, что как в закаленном, так и в упорядоченном состоянии параметры кристаллической решетки исследуемого сплава несколько больше по сравнению с эквиатомным сплавом.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (грант №21-13-00135).

1. В.М. Малышев., Д.В. Румянцев, Золото. М.: Металлургия, 1979. 288 с.
2. А.Ю. Волков, П.О. Подгорбунская, О.С. Новикова, А.И. Валиуллин, А.В. Глухов, Н.А. Кругликов Кинетика атомного упорядочения сплава Cu-56ат.%Au при температуре 250 °C, Неорганические материалы, том 5, 2023, (принято в печать)

ФОРМИРОВАНИЕ СПЛАВОВ Al-Y ДОЭВТЕКТИЧЕСКОГО СОСТАВА С МАЛЫМИ ДОБАВКАМИ Sc И Zr

Подкин Е.С.[1], Котенков П.В.[1], Шубин А.Б.[1], Гилёв И.О.[1], Попова. Э.А.[1]
[1)] Институт металлургии УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: cherdancev_egor@mail.ru

FORMATION OF Al-Y ALLOYS OF HYPOEUTECTIC COMPOSITION WITH SMALL ADDITIONS OF Sc AND Zr

Podkin E.S.[1], Kotenkov P.V.[1], Shubin A.B.[1], Gilev I.O.[1], Popova E.A.[1]
[1)] Institute of Metallurgy of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia

The study was made of the effect of small additions of transitional additives and heat treatment on the structure and service properties of Al-Y hypoeutectic alloys.

Повышение конструкционной прочности, надежности и долговечности деталей механизмов и машин — одна из основных задач современного машиностроения. Эксплуатационные характеристики, гарантирующие требуемый уровень работоспособности, преимущественно обеспечиваются созданием оптимальной структуры.

Структура алюминиевых сплавов определяется структурой и условиями синтеза. Благодаря легирующим элементам можно добиваться требуемых свойств. Алюминиевые сплавы широко используются в качестве конструкционных материалов. Одним из распространённых способов производства деталей является литье [1,2].

Известно, что эвтектические композиции обладают наилучшими литейными свойствами. В настоящее время в технике широко применяется группа эвтектических сплавов на основе алюминия с добавками кремния от 4 до 22%, которые получили название – силумины.

Существенным их недостатком является невысокие механически свойства, которые уступают литейным сплавам на основе алюминия. Однако их высокие литейные свойства, низкая стоимость, возможность вовлечения вторсырья в производство все еще позволяет занимать силуминам около 90% всего фасонного литья, а также сдерживает развитие сплавов на основе алюминия других групп [3].

Алюминиево-редкоземельные сплавы все чаще оцениваются как жаростойкие проводящие материалы нового поколения. Превосходная термическая стабильность, которая объясняется в первую очередь ограниченной растворимостью данных элементов в матрице Al и образующимися эвтектическими выделениями [4].

На основе таких сплавов Al-RE эвтектического состава можно разработать композиты типа in-situ. Максимальная рабочая температура для in-situ композитов теоретически составляет 0,9 от температуры плавления. Одним из перспективных элементов по распространенности, стоимости, температуре эвтектики (641°C) является иттрий. Сплавы на основе системы Al-Y могут работать до температуры 580°C, что теоретически значительно больше, чем силумины (400-450°C).

Благодаря высокой температуре плавления эвтектики (Al-Al3Y), низкой растворимости Y в α-Al, относительно низкой стоимости иттрия систему Al-Y рассмотрели в качестве основы для создания литейного жаропрочного сплава.

В ходе выполнения работы синтезировали 9 сплавов на основе системы Al-Y, содержание иттрия варьировали от 5 до 9% (здесь и далее в мас.%) с малыми добавками (до 0.05%) циркония и скандия.

После синтеза определяли химический состав сплавов и выполняли металлографический анализ. Данные сплавы являются дисперсионно упрочняемыми. Отжиг проводили в течение 30 часов в муфельной печи при 300 °C.

По результатам работы можно сделать следующие выводы:

1. При содержании иттрия более 6.6% кроме α-Al и эвтектики (Al+Al3Y) выделяются алюминиды Al3Y.
2. Результаты оптической и электронной микроскопии показали, что добавки циркония и скандия в количестве 0.05% не влияют на макро имикроструктуру.
3. Показатели микротвердости указывают целесообразность дальнейшего отжига.

1. Белов Н.А., Наумова Е.А., Акопян Т.К., Эвтектические сплавы на основе алюминия: новые системы легирования, Издательский дом «Руда и Металлы», (2016).
2. Фетисов Г.П., Материаловедение и технология материалов в 2 ч. Часть 1, Юрайт, (2021)
3. Колобнев И. Ф., Жаропрочность литейных алюминиевых сплавов. — М.: Металлургия, (1973).
4. Mengmeng Wang, Marko Knezevic, Ming Chen. Microstructure design to achieve optimal strength, thermal stability, and electrical conductivity of Al-7.5wt.%Y alloy. Materials Science and Engineering: A; Volume 852, (2022).

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ КЕРАМИКИ ТИТАНАТА БАРИЯ-СТРОНЦИЯ С ДОБАВКОЙ ВИСМУТА

Попов И.И.[1]
[1)] Воронежский государственный технический университет, г. Воронеж, Россия
E-mail: popovich_vano@mail.ru

DIELECTRIC PROPERTIES OF BARIUM-STRONTIUM TITANATE FERROELECTRIC CERAMIC WITH BISMUTH ADDITION

Popov I.I.[1]
[1)] Voronezh State Technical University, Voronezh, Russia

The temperature dependences of the complex permittivity in ferroelectric ceramic of barium-strontium titanate with bismuth addition were studied. It was found that the crossover of the transition from the ferroelectric to the relaxor state is observed upon addition of 6 at. % Bi.

В обычных сегнетоэлектриках фазовый переход сопровождается резким изменением кристаллической структуры и свойств при температуре Кюри [1]. В отличие от обычных сегнетоэлектриков, в релаксорных сегнетоэлектриках фазовый переход может занимать десятки и сотни градусов, что обусловлено сильно разупорядоченной структурой и образованием полярных наноразмерных областей при температурах намного выше температуры максимума диэлектрической проницаемости. При высоких температурах в параэлектрической фазе свойства релаксоров аналогичны свойствам обычных сегнетоэлектриков, в то время как в сегнетоэлектрической фазе и в области размытого фазового перехода в релаксорах наблюдается дисперсия диэлектрической проницаемости [2].

Цель работы заключалась в исследовании влияния добавки атомов висмута на диэлектрические свойства сегнетоэлектрического твердого раствора титаната бария-стронция $Ba_{0,8}Sr_{0,2}TiO_3$.

По результатам диэлектрических измерений установлено, что при добавлении атомов висмута в твердый раствор $Ba_{0,8}Sr_{0,2}TiO_3$ температура максимума диэлектрической проницаемости (T_m), связанного с кубически-тетрагональным фазовым переходом, уменьшается, а сам максимум занимает более широкую температурную область, т.е. происходит размытие фазового перехода. С помощью флуктуационной модели Исупова-Смоленского построена зависимость параметра размытия от концентрации атомов висмута. Обработка экспериментальных данных с помощью флуктуационной модели, модифицированного закона Кюри Вейсса и статистической модели [3] показала, что статистическая модель лучше всего описывает температурную зависимость диэлектрической проницаемости как выше, так и ниже T_m. С помощью

статистической модели было установлено, что концентрация атомов висмута, при которой происходит переход от сегнетоэлектрического к релаксорному поведению, составляет 6 ат. % висмута. Наличие релаксорных свойств подтверждается выполнением закона Фогеля-Фулчера, с помощью которого сделаны оценки энергии активации релаксационного процесса и температуры перехода в стеклодипольное состояние.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания (проект № FZGM-2023-0006).

1. Гриднев С.А. Основы физики полярных диэлектриков / Саарбрюккен: Академическое издательство Палмариум (2013).
2. Bokov A.A., Ye Z.-G., J. Mater. Sci, V. 41, P. 31–52 (2006).
3. Liu J., Li F., Zeng Y., Jiang Z., Liu L., Wang D., Ye Z.-G., and Jia C.-L., Phys. Rev. B., V. 96, P. 054115-1 (2017).

КАТАЛИЗАТОРЫ НА ОСНОВЕ g-C_3N_4 ДЛЯ ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКОГО ПОЛУЧЕНИЯ ВОДОРОДА ПОД ДЕЙСТВИЕМ ВИДИМОГО СВЕТА

Потапенко К.О.[1], Козлова Е.А.[1]
[1)] Институт катализа СО РАН, г. Новосибирск, Россия
E-mail: potapenko@catalysis.ru

CATALYSTS BASED ON g-C_3N_4 FOR PHOTOCATALYTIC HYDROGEN PRODUCTION UNDER VISIBLE LIGHT

Potapenko K.O.[1], Kozlova E.A.[1]
[1)] Federal Research Center Boreskov Institute of Catalysis, Novosibirsk, Russia

A series of catalysts based on g-C_3N_4 was synthesized by heat treatment of a mixture of melamine and urea. The obtained composites showed high photocatalytic activities in H_2 evolution reaction and the highest H_2 evolution rate of 5.9 μmol $g^{-1}h^{-1}$.

Ежегодно наблюдается истощение природных ресурсов, поскольку большая часть энергии, потребляемой человечеством, производится посредством сжигания ископаемого сырья. В связи с этим остро стоит вопрос диверсификации топливного баланса. Фотокатализ рассматривается как перспективная технология преобразования энергии солнечного света в энергию химических связей. Конечной целью здесь является фотокаталитическое получение водорода [1].

Графитоподобный нитрид углерода относится к полупроводникам n-типа и привлекает к себе особое внимание как фотокатализатор из-за уникальных оптических, электрических, структурных и физико-химических свойств. Узкая ширина запрещённой зоны (~2,7 эВ), химическая и термическая стабильность, подходящее положение валентной зоны и зоны проводимости позволяет использовать g-C_3N_4 для различных фотокаталитических приложений. Однако, применение большинства предложенных катализаторов ограничено низким значением площади удельной поверхности синтезируемых материалов. Следовательно, целью данной работы являлось создание эффективных фотокатализаторов на основе g-C_3N_4 для фотокаталитического получения водорода под действием видимого излучения.

В данной работе были синтезированы материалы на основе графитоподобного нитрида углерода методом термической обработки смеси меламин:мочевина. В процессе синтеза варьировали температуру прокаливания, время прокаливания, соотношение меламин:мочевина. Полученные образцы модифицировали частицами Pt методом мягкого химического восстановления H_2PtCl_6. Фотокаталитическую активность определяли в реакции выделения водорода из водного раствора триэтаноламина (10 об.% ТЭА) при облучении

видимым светом (425 нм). Наилучшую активность в процессе фотокаталитического выделения водорода проявили катализаторы серии 1 масс.% Pt/g-C_3N_4 (1:3), полученные методом прокаливания смеси меламин:мочевина в соотношении 1:3, скорость выделения H_2 составила 5,9 ммоль $г^{-1}$ $ч^{-1}$. Синтетический подход, предложенный в данной работе, позволяет получить высокоактивные катализаторы благодаря образованию в процессе синтеза промежуточного супрамолекулярного комплекса меламин-циануровая кислота (МЦК), который при дальнейшем нагревании превращается в g-C_3N_4, характеризующийся высоким значением площади удельной поверхности, а также развитой системой пор.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект № 21-13-00314.

1. E.A. Kozlova, V.N. Parmon, Russ. Chem. Rev 86, № 11, 870–906 (2017)

ЯМР ^{57}Fe В НАНОЧАСТИЦАХ КАРБИДА ЖЕЛЕЗА Fe_3C

Прокопьев Д.А.[1], Гермов А.Ю.[1], Михалёв К.Н.[1], Уймин М.А.[1, 2], Новиков С.И.[1], Гавико В.С.[1], Минин А.С.[1, 2]
[1)] Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: prokopev.dima@mail.ru

^{57}Fe NMR IN IRON CARBIDE Fe_3C NANOPARTICLES

Prokopyev D.A.[1], Germov A.Yu.[1], Mikhalev K.N.[1], Uimin M.A.[1, 2], Novikov S.I.[1], Gaviko V.S.[1], Minin A.S.[1, 2]
[1)] M.N. Miheev Institute of Metal Physics of Ural Branch of Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia
[2)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

NMR spectra Fe_3C iron carbide in the long-range magnetic order region in the temperature range 4.2-350 K. were obtained and analyzed. Hyperfine fields for two nonequivalent positions of iron atoms in the structure (Pnma) of this compound and their evolution with decreasing temperature are determined

Ɵ-карбид железа Fe_3C является ферромагнетиком с T_C ~ 488 К [1,2]. Структура этого соединения орторомбическая, пространственная группа Pnma [2]. Это соединение очень популярно в металлургической промышленности, так как является одной из основных составляющих углеродистых сталей. Однако, его достаточно сложно получить в чистом виде.

Результаты, полученные методом гамма-резонанса, в значительной степени разнятся [3-5]. Часть данных утверждает о наличии лишь одного секстета, однако известно, что в орторомбической структуре цементита (Pnma) должно быть две кристаллографически неэквивалентных позиции (Fe1, Fe2). Также отметим, что ранее полученные данные ЯМР в Fe@C [3], показали наличие неизвестной линии в области низких частот, которая была отнесена к карбиду железа Fe_3C, однако это утверждение нуждается в практическом подтверждении. На данный момент в литературе нет данных полученных на данном соединении методом ЯМР.

В этой работе представлено первое систематическое исследование карбида железа методом ЯМР, совместно с данными магнитных измерений и рентгеновской дифракции.

Для механосинтеза карбида железа использовался отсев порошка карбонильного железа (99.9%) фракции менее 100 мкм и толуол (C_7H_8) ЧДА. Карбонизация проводилась с использованием гарнитуры выполненной из композита карбида вольфрама с 6 масс. % Co.

Средний размер полученных наночастиц равен 52 нм. Кривая перемагничивания типична для этого ферромагнетика с намагниченностью насыщения Ms = 102 emu/g (144 emu/g для поликристаллического образца).

Спектры ЯМР ^{57}Fe, полученные в магнитоупорядоченном состоянии в локальном поле на низких температурах, представляют собой неоднородно уширенные одиночные линии. Слабая асимметрия наблюдается в области гелиевых температур. Максимум линии ЯМР ^{57}Fe при T=295 K соответствует частоте 28.4 МГц (H = 207(5) кЭ). Это значение наведенного поля совпадает с результатами, полученными методом гамма-резонанса для позиции Fe1.

Работа выполнена в рамках гос. тем «Функция» Г.р. № 122021000035-6 и «Магнит» Г.р. № 122021000034-9.

1. C. EKSTROM and W. A. ADOCK, J. Amer. Chem. Soc. 72 (1950) 1042
2. Fasiska E.J.,Jeferey G.A. Acta.Crystal. 19 (1965) 463-471
3. A.Yu. Germov D.A. Prokopyev, K.N. Mikhalev, B.Yu. Goloborodskiy, M.A. Uimin, A.E. Yermakov, A.S. Konev, A.S. Minin, S.I. Novikov, V.S. Gaviko, A.M. Murzakaev, Materials Today Communications. 27 (2021) 102382
4. V.A.Barinov, V.A.Tsurin, KazancevV.A., Surikov V.T., FMM 115 (2014) 57
5. B. David, O. Schneeweiss, F. Dumitrache, C. Fleaca, R. Alexandrescu, I.Morjan. J. of Physics: Conference Series 217 (2010) 012097.

СИНТЕЗ, СТРУКТУРА И ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА Sc-ДОПИРОВАННЫХ СЛОИСТЫХ ПЕРОВСКИТОВ НА ОСНОВЕ $SrLa_2Sc_2O_7$

Пьянков Д.Н.[1], Абакумова Е.В.[1, 2], Бедарькова А.О.[1, 2], Тарасова Н.А.[1, 2], Анимица И.Е.[1, 2]

[1)] Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия

[2)] Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: danchvin@gmail.com

SYNTHESIS, STRUCTURE AND TRANSPORT PROPERTIES OF Sc-DOPED LAYERED PEROVSKITE BASED ON $SrLa_2Sc_2O_7$

Pyankov D.N.[1], Abakumova E.V.[1, 2], Bedarkova A.O.[1, 2], Tarasova N.A.[1, 2], Animitsa I.E.[1, 2]

[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

[2)] The Institute of High Temperature Electrochemistry of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia

The acceptor-doped two-layer perovskites based on SrLa2Sc2O7 were synthesized by solid-phase method. The possibility of water absorption was confirmed by thermogravimetric measurements. The conductivity was measured at varying T and pH2O.

Протонно-керамические топливные элементы и протонно-керамические электролизные элементы играют немаловажную роль в создании экологически чистых систем энергоснабжения. Эти электрохимические устройства включают в себя ряд компонентов, в том числе, электроды и электролит.

Наиболее изученными протонпроводящими материалами для применения в качестве электролита являются церато-цирконаты бария, $BaCeO_3$ – $BaZrO_3$. Однако в последние годы активно изучаются новые классы протонпроводящих материалов, такие, как и слоистые перовскиты.

$AA'_nB_nO_{3n+1}$ является общей формулой для такого нового класса протонпроводящих материалов, как слоистые перовскиты, где A – щелочноземельный металл, например стронций (Sr), A’ – редкоземельный металл, одним из таких является лантан (La), B – трехвалентный металл, такой как скандий (Sc) или индий (In), а n – количество слоев перовскита. Если n = 1, то формула приобретает вид $AA'BO_4$. Для веществ, имеющих данную формулу, была доказана способность к протонному переносу. Примером могут служить такие вещества, как $SrLaInO_4$ и $BaNdScO_4$. Если количество слоев перовскита взять равным двум, то формула принимает вид $AA'_2B_2O_7$. К примеру, составы $BaLa_2In_2O_7$ и $BaNd_2In_2O_7$, которые были получены несколько десятилетий назад, в 2022 году доказали, что могут служить в качестве протонпроводящих материалов, причем значения протонной проводимости увеличиваются в ряду

$BaLa_2In_2O_7$ – $BaNd_2In_2O_7$, а доминирующими оказываются при температуре ниже 350°C во влажном воздухе [1]. Данное открытие дает возможность говорить о том, что сложные оксиды со структурой слоистого перовскита нуждаются в дальнейшем материаловедческом исследовании.

В настоящей работе впервые была изучена возможность допирования подрешетки Sc сложного оксида $SrLa_2Sc_2O_7$ атомами Y, Ti, In и Gd; выполнено исследование физико-химических свойств допированных слоистых перовскитов.

1. Tarasova N. Layered Perovskites $BaLn_nIn_nO_{3n+1}$ (n = 1, 2) for Electrochemical Applications: A Mini Review // Membranes 2023, 13, 34. doi: 10.3390/membranes13010034

ВЛИЯНИЕ ЧАСТИЧНОГО ЗАМЕЩЕНИЯ СВИНЦА НА СТАБИЛЬНОСТЬ ГИБРИДНЫХ ПЕРОВСКИТОВ К МОЩНЫМ ПОТОКАМ ЭЛЕКТРОНОВ

Расметьева А.В.[1], Устинова М.И.[2], Кухаренко А.И.[1], Сарычев М.Н.[1], Трошин П.А.[2], Жидков И.С.[1]
[1)] Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия
[2)] ФИЦ ПХФ и МХ РАН, г. Черноголовка, Россия
E-mail: a.v.rasmetieva@urfu.ru

THE EFFECT OF PARTIAL LEAD SUBSTITUTION ON THE STABILITY OF HYBRID PEROVSKITES UNDER POWERFUL ELECTRON FLUXES

Rasmetyeva A.V.[1], Ustinova M.I.[2], Kukharenko A.I.[1], Sarychev M.N.[1], Troshin P.A.[2], Zhidkov I.S.[1]
[1)] Ural federal university, Ekaterinburg, Russia
[2)] FRC PCP and MC RAS, Chernogolovka, Russia

Perovskites with partial lead substitution $CsFAM_xPb_{1-x}I_3$ (where M is various metals) were studied by XRD analysis, UV-VIS, PL spectroscopy, AFM, IR S-SNOM, SEM. Perovskites with M = La^{3+}, Lu^{3+}, Ag^{+} and Dy^{2+} have shown remarkable stability under electron irradiation.

Металлогалогенные перовскитные солнечные элементы демонстрируют самый большой потенциал для фотогальванических технологий из-за их низкой стоимости, подходящей ширины запрещенной зоны и высокой эффективности преобразования солнечной энергии [1]. Однако, токсичность свинца и содержание точечных дефектов в поликристаллических пленках является актуальной проблемой, решением которой может стать частичное замещение свинца [2]. В последнее время наблюдается растущий интерес к исследованиям перовскитных солнечных элементов для космоса. При этом важнейшим фактором в условиях космоса может оказаться воздействие излучения космических частиц. В данной работе мы рассматриваем влияние частичного замещения свинца на стабильность гибридных перовскитов к мощным потокам электронов.

Для изучения систем $CsFAM_xPb_{1-x}I_3$ с частичным замещением свинца было выбрано 32 системы: референсный $CsFAPbI_3$ и системы, содержащие 31 различный катион в количестве 1 мольный процент по отношению к содержанию свинца, т.е. составы $CsFAM_{0.01}Pb_{0.99}I_3$, где M = Mn^{+} = Bi^{3+}, Eu^{2+}, Zn^{2+}, Fe^{2+}, Sn^{2+}, Ba^{2+}, Cd^{2+}, Sn^{4+}, Hg^{2+}, Pt^{2+}, Co^{2+}, Ce^{3+}, Ag^{+}, Ca^{2+}, Nd^{3+}, Ni^{2+}, La^{3+}, Sr^{2+}, Mn^{2+}, Ge^{2+}, Dy^{2+}, Er^{3+}, Cu^{+}, Lu^{3+}, Mg^{2+}, Sb^{3+}, Tb^{3+}, Y^{3+}, In^{3+}, Gd^{3+} и Yb^{2+}. Наборы образцов, получившие 5 различных доз электронов ($1\cdot10^{14}$, $3\cdot10^{14}$, $1\cdot10^{15}$, $3\cdot10^{15}$ и $1\cdot10^{16}$

е/см^2) были исследованы на предмет изменения оптоэлектрических характеристик.

Из анализа данных по интенсивности и положению максимум ФЛ мы выделили 15 наиболее стабильных материалов, где M = Eu^{2+}, Sr^{2+}, Ge^{2+}, Cu^{+}, La^{3+}, Ce^{3+}, Tb^{3+}, Yb^{2+}, Dy^{2+}, Y^{3+}, Er^{3+}, Lu^{3+}, Gd^{3+}, Ni^{2+} и Ag^{+}. Все эти материалы при облучении электронами демонстрируют только незначительные изменения в ФЛ относительно референсных значений.

Облучение электронами вызывает образование на поверхности мелких зерен, очертания которых на картах соответствуют повышенному содержанию в них катиона FA^{+}, что указывает на фазовую сегрегацию с образованием отдельных кристаллитов $FAPbI_3$.

Изображения пленок, полученные с использованием сканирующей электронной микроскопии, показали уменьшение кристалличности материала и появление новых мелких зерен в пленках. Другим важным результатом стало наблюдение механической деградации отдельных пленок. Материал вблизи границ трещин шириной 0,5 мкм имеет низкую проводимость, вероятно, из-за разложения на желтые фазы δ-$CsPbI_3$ и δ-$FAPbI_3$.

Наибольшую устойчивость морфологии пленок к облучению электронами продемонстрировали составы $Cs_{0.12}FA_{0.88}Pb_{0.99}La_{0.01}I_{\sim 3}$, $Cs_{0.12}FA_{0.88}Pb_{0.99}Lu_{0.01}I_{\sim 3}$, $Cs_{0.12}FA_{0.88}Pb_{0.99}Ag_{0.01}I_{\sim 3}$ и $Cs_{0.12}FA_{0.88}Pb_{0.99}Dy_{0.01}I_3$: их пленки практически не содержат трещин и новообразовавшихся зерен на поверхности. В остальных случаях, характер образующихся трещин и их регулярность указывают на то, что их появление может быть связано с особенностью фокусировки пучка электронов на установке для облучения.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 22-61-00047.

1. W. Nie et al., Science 10, 522 (2015).
2. J.W. Wang et al., Energy Environ. Sci. 9, 2892 (2016).

ЭЛЕКТРОФОРЕТИЧЕСКОЕ ОСАЖДЕНИЕ ПЛЕНОК НА ОСНОВЕ ДИОКСИДА ЦЕРИЯ, МОДИФИЦИРОВАННОГО $SrTiO_3$, ДЛЯ ТОТЭ С НЕСУЩИМ АНОДОМ

Русакова Д.С.[1], Павлова И.А.[1], Ермакова Л.В.[2], Пикалова Е.Ю.[1, 3], Калинина Е.Г.[1]
[1)] Институт электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Институт химии твердого тела УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
[3)] Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: r.dasha.ds@yandex.ru

ELECTROPHORETIC DEPOSITION OF CeO_2-BASED THIN-FILM ELECTROLYTE, MODIFIED $SrTiO_3$, FOR ANODE-SUPPORTED SOFC

Rusakova D.S.[1], Pavlova I.A.[1], Ermakova L.V.[2], Pikalova E.Yu.[1, 3], Kalinina E.G.[1]
[1)] Institute of Electrophysics of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia
[2)] Institute of Solid State Chemistry of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia
[3)] Institute of High-Temperature Electrochemistry of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia

The aim of this work was to determine the possibility of creation the dense CeO_2-based electrolyte membranes on anode substrates by the electrophoretic deposition. The SDC suspensions were modified by the $SrTiO_3$ addition. The microstructure studies of deposited and sintered films were carried.

Твердооксидные топливные элементы (ТОТЭ) – устройства, вырабатывающие электрическую энергию за счет энергии химической реакции между топливом и окислителем. Развитие ТОТЭ обусловлено их высокой эффективностью и экологической чистотой. Для среднетемпературных ТОТЭ перспективным материалом в качестве твердого электролита является диоксид церия, допированный самарием [1]. Перспективной технологий для формирования тонкопленочных покрытий электролита на анодных подложках ТОТЭ является электрофоретическое осаждение (ЭФО), которое не требует высокотехнологичного оборудования и может быть адаптировано к массовому производству [2]. Настоящая работа посвящена электрофоретическому формированию тонкопленочных покрытий на основе $Ce_{0.8}Sm_{0.2}O_{1.9}$ (SDC) с добавкой $SrTiO_3$ на пористых анодных подложках 50% NiO-50% $BaCe_{0.8}Sm_{0.19}Cu_{0.1}O_3$ (NiO-BCSCuO) и 50% NiO-50% $Ce_{0.8}Sm_{0.2}O_{1.9}$ (NiO-SDC), а также сравнительному исследованию спекаемости и микроструктуры полученных композитных покрытий SDC-$SrTiO_3$.

Пористые анодные подложки NiO-BCSCuO и NiO-SDC были изготовлены из смеси порошков в соотношение 50/50 с добавлением графита в качестве

порообразователя методом одноосного полусухого прессования с последующим спеканием (1200°C, 4 ч). В качестве материалов для формирования покрытий электролита использовали порошки SDC различной дисперсности, полученные глицин-нитратным методом (SDC-MPs, $S_{уд}$ = 12 м²/г) и лазерным испарением конденсацией (SDC-NPs, $S_{уд}$ = 83 м²/г). По данным РФА образцы порошков SDC были однофазными и имели кубическую структуру (пр.гр. Fm-3m (225)) с параметром решетки: SDC-MPs – a = 5.431(1) Å, SDC-NPs – a = 5.429(3) Å. К порошку SDC добавляли 5 мол.% $SrTiO_3$ ($S_{уд}$ = 3 м²/г), полученного методом горения из растворов. По данным РФА, порошок $SrTiO_3$ имел кубическую структуру перовскита (пр.гр. Pm-3m (221)) с параметром решетки a = 3.904(3) Å. Суспензию SDC с добавкой $SrTiO_3$ (10 г/л) готовили по точной навеске порошков в смешанной дисперсионной среде изопропанол/ацетилацетон (70/30 об.%) с последующей ультразвуковой обработкой (УЗО) в течение 5–125 мин. Для стабилизации суспензии потребовалось ввести 10 вес.% SDC-NPs. Установлено, что увеличение длительности УЗО способствует увеличению ζ–потенциала. После 125 мин УЗО ζ–потенциал суспензии составил + 11 мВ (pH = 5.7).

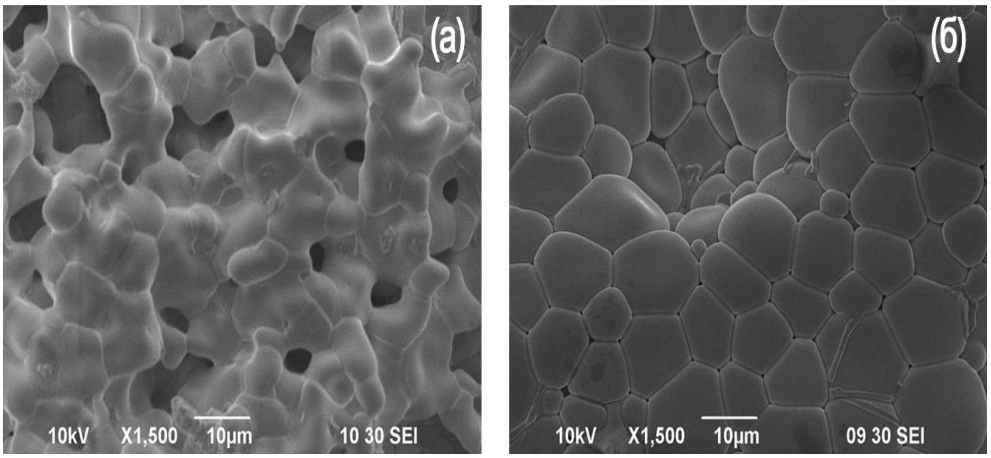


Рис. 1. СЭМ изображения спеченных покрытий SDC-$SrTiO_3$: (а) на анодной подложке NiO-SDC при температуре 1550°C, 5 ч; (б) на анодной подложке NiO-BCSCuO при температуре 1450°C, 5 ч.

Методом ЭФО сформированы покрытия из суспензии на основе порошка SDC, модифицированного 5 мол.% $SrTiO_3$, толщиной 16 и 21 мкм на анодных подложках NiO-SDC и NiO-BCSCuO, соответственно, с последующим спеканием при температурах 1550°C и 1450°C (5 ч). Установлено, что при спекании на анодной подложке NiO-SDC плотного покрытия SDC-$SrTiO_3$ не сформировалось (Рис. 1 а) в отличие от спеченного покрытия SDC-$SrTiO_3$ на подложке NiO-BCSCuO (Рис. 1 б). По данным EDX-анализа при спекании покрытия на подложке NiO–BCSCuO произошла диффузия бария из подложки в покрытие, что способствовало интенсификации процессов спекания и позволило получить плотную пленку SDC-$SrTiO_3$.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-23-00066, https://rscf.ru/project/22-23-00066/.

1. Pikalova E.Yu., Murashkina A.A., Maragou V.I., Demin A.K., Strekalovsky V.N., Tsiakaras P.E., International Journal of Hydrogen Energy, 36, 36, 6175–6183, (2011).
2. Kalinina E.G., Pikalova E.Y., Russian Chemical Reviews, 88, 1179, (2019).

РАЗРАБОТКА КИСЛОРОДНЫХ АККУМУЛЯТОРОВ $SrFe_{12}O_{19}$ И $BaFe_{12}O_{19}$ ДЛЯ ТЕХНОЛОГИИ ХИМИЧЕСКОГО ЦИКЛИРОВАНИЯ

Рыжов Д. А.[1], Меркулов О. В.[2]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Институт химии твердого тела Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: dmitryryzhov2709@gmail.com

DEVELOPMENT OF $SrFe_{12}O_{19}$ AND $BaFe_{12}O_{19}$ OXYGEN ACCUMULATORS FOR CHEMICAL CYCLING TECHNOLOGY

Ryzhov D. A.[1], Merkulov O. V.[2]
[1)] Ural Federal University named after the First President of Russia B.N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia
[2)] Institute of Solid State Chemistry of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia

The study evaluates $(Sr,Ba)Fe_{12}O_{19}$ oxides for their potential use in chemical cycling technology. $SrFe_{12}O_{19}$ has a higher oxygen capacity and remains stable after 9 cycles, making it a promising candidate for an oxygen accumulator. $BaFe_{12}O_{19}$ degrades over time, indicating limitations in its use.

Постоянно возрастающий уровень энергопотребления человечества в совокупности с ухудшением всеобщей экологической ситуации требует поиска новых способов переработки горючих ископаемых, альтернативных существующим технологиям. Одним из многообещающих подходов, является технология химического циклирования, объединяющая производство энергии и улавливание углекислого газа. В данном процессе используются кислородные аккумуляторы способные отдавать или поглощать кислород в зависимости от внешних условий. Исследование функциональных материалов, их свойств и разработка новых аккумуляторов кислорода являются важнейшими задачами для повышения эффективности процесса химического циклирования [1].

В рамках настоящей работы проведена оценка характеристик кислородных аккумуляторов на основе $AFe_{12}O_{19}$ (A=Sr,Ba).

Оксиды гексаферритов стронция и бария синтезировали глицин-нитратным методом. Аттестация образцов проводилась с помощью рентгеновской дифракции. Результаты полученные после РФА свидетельствуют об образовании однофазных оксидов с гексагональной структурой (пр.гр P63/mmc). Метод кулонометрического титрования использовался для измерения содержания кислорода в образцах в зависимости от температуры (750–950°C) и парциального давления кислорода (10^{-22} – 0.21 атм.). Стабильность и кислородная емкость гексаферритов оценивалась в условиях циклических термогравиметрических

испытаниях, при поэтапном изменении атмосферы от 5% газовой смеси H_2/Ar до воздуха при 850˚C (рис 1.)

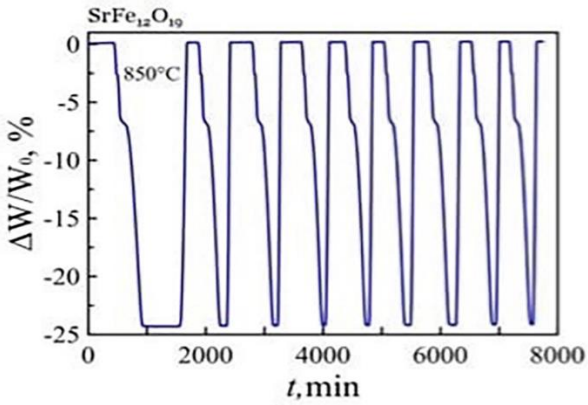


Рис. 1. Результаты термогравиметрического анализа $SrFe_{12}O_{19}$ при окислительно-восстановительном циклировании.

Результаты кулонометрического титрования оксидов продемонстрировали ступенчатый характер изменения содержания кислорода, указывающий на многостадийность фазового распада. $SrFe_{12}O_{19}$ распадается в 3 стадии: $SrFe_{1219}$ → Fe_3O_4→$Fe_{1-x}O$→Fe^0, при этом на каждой стадии распада присутствует инертная фаза $Sr_4Fe_6O_{13}$. Для образца $BaFe_{12}O_{19}$, фазовое разложение протекает по более сложному пути с образованием частиц $BaFe_2O_4$ и $BaFeO_{2.5+\delta}$. В случае $SrFe_{12}O_{19}$ на протяжении 9 окислительно-восстановительных циклов изменение массы гексаферрита оставалось постоянным. Кислородная емкость данного оксида составила 25%. В свою очередь кислородная емкость оксида $BaFe_{12}O_{19}$ равняется 23%, но для полного окисления/восстановления оксида для каждого последующего цикла требовалось большее количество времени, чем для предыдущего. Это свидетельствует о деградации материала, что связано с процессом спекания частиц порошка, оказывающего влияние на кинетику процессов окисления/восстановления.

Гексаферрит стронция обладает высокой кислородной емкостью и в ходе его фазового разложения образуется субстрат, препятствующий спеканию частиц в ходе окислительно-восстановительных реакций, все это делает данный материал перспективным для его применения в качестве кислородного аккумулятора.

Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда, проект № 22-79-00229.

1. Adanez, J.; Abad, A.; Garcia-Labiano, F.; Gayán, P.; de Diego, L.F. Progress in Chemical-Looping Combustion and Reforming technologies. Prog. Energy Combust. Sci. 2012, 38, 215–282.

СРАВНЕНИЕ ВЕЛИЧИН ВЯЗКОСТИ, ТЕМПЕРАТУРЫ СТЕКЛОВАНИЯ И ПЛОТНОСТИ РАСПЛАВА xNa_2O-(100-x) B_2O_3 ОТ СОСТАВА

Самойлова М.А.[1], Хохряков А.А.[1], Ведмидь Л.Б.[1]
[1)] Институт металлургии УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: mari.makarenko.1993@mail.ru

COMPARISON OF VISCOSITY, GLASS TRANSITION TEMPERATURE AND DENSITY OF MELT xNa_2O-(100-x) B_2O_3 FROM COMPOSITION

Samoylova M.A.[1], Khokhryakov A.A.[1], Vedmid' L.B.[1]
[1)] Institute of metallurgy UrO RAN, Yekaterinburg, Russia

Viscosity and glass transition temperature are structural- sensitive properties and depend on alkali content in alkali-boron melts.

Физико-химические свойства боратных расплавов зависят не только от типа структурных единиц, но и от характера взаимодействия между ними и подвижности частиц. Натриевоборатный расплав является неоднородной системой, в которой реализуются короткие ковалентные и дальнодействующие кулоновские связи.

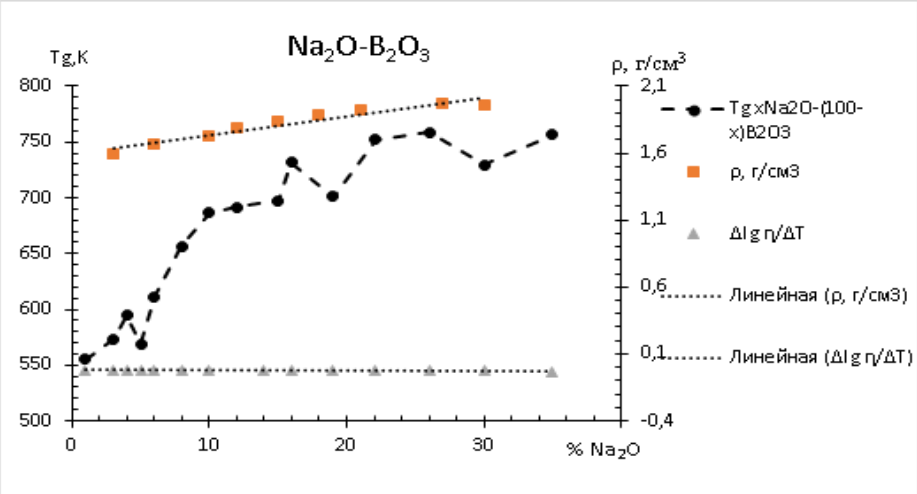


Рис. 1. Зависимость температуры стеклования (Tg), плотности (ρ) и $\Delta \lg \eta / \Delta T$ от состава расплава

Из рис.1 видно, что плотность расплавов растёт с увеличением концентрации Na_2O, тогда как отношение $\Delta \lg \eta/\Delta T$последовательно уменьшается. Такое изменение свойств расплава вызвано разрушением B-Ø связей (Ø – мостиковый кислород) и увеличением доли ионности связей B-O-…Na+. Это является основной причиной увеличения плотности и уменьшения вязкости расплавов.

Температура стеклования зависит от числа и типов структурных единиц, их подвижности и формируемой этими частицами фононной составляющей расплава. Наблюдаемые экстремумы на зависимости температуры стеклования от состава связаны с трансформационными изменениями в сетке расплава, которые обнаруживаются в комбинационном рассеянии света [1].

Несмотря на рост межчастичных ионных связей в сетке расплава, в системе сохраняются затянутые релаксационные процессы, связанные с различной динамикой движения частиц жидкости. Увеличение при этом энтропийной составляющей приводит к увеличению Tg с ростом в расплаве содержания Na_2O.

Работа выполнена в рамках Госзадания ИМЕТ УрО РАН

1. Осипов А. А., Осипова Л. М. спектроскопия и структура щелочноборатных стекол. Екатеринбург-Миасс. Уро РАН. 2009. 174 с.

СПЕКТРАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ В ОЦЕНКЕ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ СПЛАВОВ GdTbDyHoSc И GdTbDyHoY

Скрыльник М.Ю.[1], Зайцева П.В.[1], Сипатов И.С.[1], Шуняев К.Ю.[1]
[1)] Институт металлургии УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: mariyaskrylnik@mail.ru

SPECTRAL ANALYSIS IN EVALUATION OF ELECTROCHEMICAL BEHAVIOR OF HIGH-ENTERTROPIC ALLOYS GdTbDyHoSc AND GdTbDyHoY

Skrylnik M.Yu.[1], Zaitceva P.V.[1], Sipatov I.S.[1], Shunyaev K.Y.[1]
[1)] Institute of Metallurgy of the Ural Branch of Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia

In this paper, time series of potential fluctuations in samples of high-entropic alloys GdTbDyHoSc and GdTbDHoY at different current densities were obtained. Spectral methods of time series analysis were used to establish the character of corrosion behavior of the alloys under study.

Высокоэнтропийные сплавы (ВЭС), из-за случайного распределения различных элементов в кристаллической структуре, можно считать локально неупорядоченными химическими системами [1]. Коррозионное поведение неупорядоченных систем относят к стохастическим случайным процессам. Описание таких процессов требует, наряду с классическими электрохимическими методами, более сложных инструментов в получении и анализе данных [2]. К их числу относят измерение электрохимического шума с последующим анализом результатов с помощью спектральных методов, таких как быстрое преобразование Фурье (БПФ) и вейвлет-анализ (ВА) [2-3]. Применимость подобных инструментов к изучению электрохимического поведения ВЭС заслуживает отдельного исследования.

В данной работе были получены временные ряды (ВР) колебания потенциала на поверхности ВЭС состава GdTbDyHoSc и GdTbDHoY [4] при 12 часовой выдержке в среде 0,01M NaCl, с наложением тока различной плотности (j) от 0,2 до 0,5 мА/см^2. Такой подход позволяет моделировать различную степень интенсивности электрохимического растворения поверхности исследуемых образцов и, как следствие, оценить эффективность применения методов БПФ и ВА для мониторинга и анализа коррозионного поведения ВЭС.

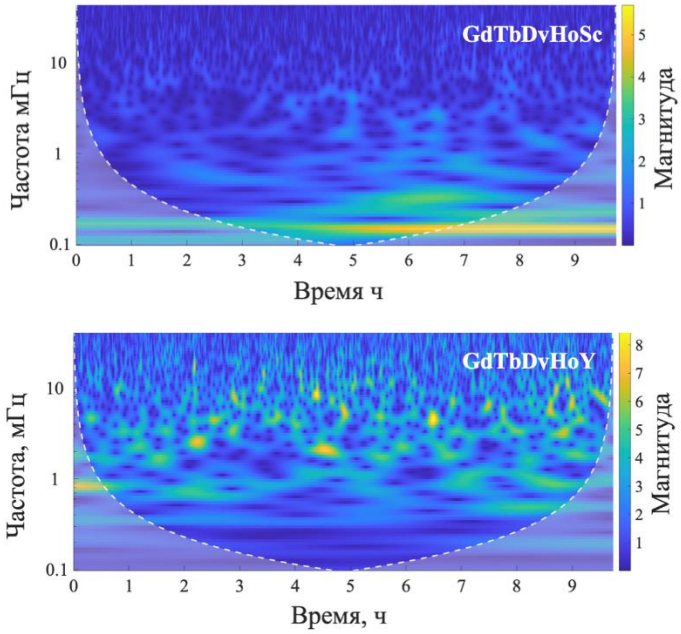


Рис. 1. Скалограммы образцов GdTbDyHoSc и GdTbDHoY после 12 часовой выдержки в 0,01M NaCl при плотности тока 0,5 мА/см^2

Полученные ВР для каждой j были обработаны методом БПФ, построены спектрограммы колебания потенциала и рассчитаны угловые коэффициенты наклона спектральной плотности мощности (k). Согласно полученным данным, k для обоих исследуемых образцов увеличивается при увеличении j, что указывает на изменение характера коррозионного поведения исследуемых образцов. Для образца GdTbDyHoY k меняется от -1,96 до -1,79 при увеличении j с 0,2 до 0,5 мА/см^2. Согласно литературным данным [3, 5], k∽-2 соответствует области преобладания локального коррозионного растворения. Для образца GdTbDyHoSc при увеличении j с 0,2 до 0,5 мА/см^2 k меняется от -1,46 до -1,28, что, согласно литературным данным, соответствует преобладанию общей коррозии.

С помощью ВА построены скалограммы колебания потенциала на образцах GdTbDyHoSc и GdTbDyHoY. В результате визуального анализа скалограмм установлено, что при увеличении j количество очагов коррозии возрастает и, как следствие, увеличивается площадь коррозионного поражения. Максимальное количество осцилляций потенциала наблюдается на образце GdTbDyHoY в сравнении с образцом GdTbDyHoSc. В качестве примера на Рис.1 представлены скалограммы исследуемых образцов при плотности тока 0,5 мА/см^2.

Исходя из полученных данных, можно сказать, что методы БПФ и ВА являются эффективными инструментами для глубокого понимании коррозионного поведения локально неупорядоченных химических систем, таких как ВЭС состава GdTbDyHoSc и GdTbDHoY. Не требуя сложной технической реализации, данные спектральные методы анализа могут использоваться для

оценки коррозионного поведения ВЭС, в дополнение к классическим электрохимическим методам.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, в рамках проекта № 21-43-00015.

1. J.W. Yeh, S.K. Chen, S.J. Lin, Adv. Eng. Mater, 6, 299-300 (2004).
2. T. Fukuda, T. Mizuno, Corrosion Science, 38 (7), 1085-1091 (1996).
3. O.J. Ramos-Negron, R.F. Escobar-Jimenez, J.H. Arellano-Perez, Journal of Electroanalytical Chemistry, 8557, 113597 (2019).
4. С.А. Упоров, С.Х. Эстемирова, Е.В. Стерхов, П.В. Зайцева, М.Ю. Скрыльник, К.Ю. Шуняев, А.А. Рempель, Расплавы, 5, 443-453 (2022).
5. L. He, Y. Jiang, Y. Guo et all, Science and Technology, 51, 187-194 (2016).

РАЗРАБОТКА МЕТОДОВ СИНТЕЗА И ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ ПЕРОВСКИТОВ НА ОСНОВЕ $CeAlO_3$

Смелов А.О.[1], Корона Д.В.[1], Анимица И.Е.[1, 2]
[1)] Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия
[2)] ИВТЭ УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: alex_smelov@mail.ru

DEVELOPMENT OF SYNTHESIS METHODS AND INVESTIGATION OF PROPERTIES OF PEROVSKITES BASED ON $CeAlO_3$

Smelov A.O.[1], Korona D.V.[1], Animitsa I.E.[1, 2]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia
[2)] Institute of High Temperature Electrochemistry, Yekaterinburg, Russia

This article is devoted to the development of the solid state and solution combustion synthesis method and investigation of the properties of perovskite compounds based on $CeAlO_3$. Structure, phase stability, conductivity and thermal expansion have been investigated.

Для современного мира важен переход от использования ископаемых видов топлива к экологически чистым видам. Одним из них является водород. Он используется в твердооксидных топливных элементах, как топливо. Разработки топливных элементов ведутся по всему миру, в 2020 году в России был утвержден план по развитию водородный энергетики до 2024 года. На данный момент стоит проблема поиска новых анодных материалов для топливных элементов. Перспективными анодами могут оказаться сложные оксиды со структурой перовскита на основе Ce(III).

В настоящей работе проведена разработка твердофазного и растворного методов синтеза и исследование проводимости и химической устойчивости материалов на основе алюмината церия $CeAlO_3$ со структурой перовскита, допированного ионами Ca^{2+}.

В качестве исходных веществ для твердофазного синтеза были взяты: $Ce_2(CO_3)_3{\cdot}5\ H_2O$, Al_2O_3, $CaCO_3$ и $(NH_4)_2C_2O_4$ для создания восстановительных условий. Исходные навески были перетерты в агатовой ступке в среде этилового спирта. Отжиг проводился на таблетированных образцах с постепенным повышением температур от 900 °C до 1400 °C, в атмосфере азота, дополнительно в качестве восстановителя использовался уголь.

В качестве исходных веществ для растворного синтеза методом сжигания раствора были взяты: $(NH_4)_2Ce(NO_3)_6$, $Al(NO_3)_3{\cdot}9H_2O$, $CaCO_3$, глицин. Карбонат кальция был растворен в концентрированной азотной кислоте, затем его приливали к раствору, приготовленному из остальных исходных веществ в минимальном количестве воды. Данная смесь выпаривались на водяной бане до

загустения, затем была перенесена в тигель. Тигель был поставлен в кварцевую трубку, продуваемую азотом. Затем трубка нагревалась на плитке, при температуре около 300 ºС произошло возгорание смеси с увлечением объема. Получившийся порошок был перетерт в агатовой ступке в среде гексана с добавлением клея на основе натурального каучука, затем смесь была сформирована в таблетки и отожжена в трубчатой печи в потоке азота в течение 10 часов при температуре 1100 ºС.

Был проведен рентгенофазовый анализ получившихся образцов $CeAlO_3$ и $Ce_{0.9}Ca_{0.1}AlO_{2.95}$, синтезированных твердофазным и растворными методами синтеза. Проведены исследования электропроводности методом электрохимического импеданса в зависимости от температуры и от парциального давления кислорода, измерены числа переноса методом ЭДС, исследована устойчивость в различных атмосферах, рассчитан коэффициент термического расширения из дилатометрических данных.

1. Wang X., Yamada H., Nishikubo K., Xu C. Synthesis and Electric Property of $CeAlO_3$ Ceramics // Japanese Journal of Applied Physics – 2005. – V. 44, № 2. – P. 961-963
2. Aruna S. T., Kini N. S., Shetty S., Rajam K. S. Synthesis of nanocrystalline $CeAlO_3$ by solution-combustion route // Materials Chemistry and Physics – 2010. – № 119. – P. 485-489

ИМПУЛЬСНО-ДУГОВАЯ СВАРКА В ЗАЩИТНЫХ ГАЗАХ С ДОПОЛНИТЕЛЬНОЙ ГОРЯЧЕЙ ПРИСАДКОЙ ВЫСОКОПРОЧНЫХ ЗАКАЛИВАЮЩИХСЯ СТАЛЕЙ

Смоленцев М.С.[1], Смоленцев А.С.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: smolentseff.misha@yandex.ru

PULSE ARC SHIELDED GAS WELDING WITH ADDITIONAL HOT FILLER OF HIGH-STRENGTH HARDENING STEELS

Smolentsev M.S.[1], Smolentsev A.S.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

An installation for pulsed arc welding in shielding gases with the supply of an additional hot additive with indirect heating to the tail part of the weld pool has been developed.

Одной из перспективных технологий сварки является дуговая сварка в защитных газах с дополнительной подачей в хвостовую часть сварочной ванны дополнительной горячей присадки (ДГП) [1–5]. Ввод ДГП, подогретой до температуры 1000–1200 ℃ путем внедугового электроконтактного нагрева, позволяет снижать среднюю температуру сварочной ванны, так как введенный материал является охладителем сварочной ванны. Регулируя скорость подачи дополнительной горячей присадки, можно влиять на термический цикл сварки (ТЦС), долю участия основного металла (ОМ) и коэффициент наплавки [1, 2]. За счет расплавления ДГП теплотой сварочной ванны без дугообразования и каплеобразования удается значительно повысить коэффициенты перехода легирующих элементов в металл шва (МШ) [1]. Наибольшие преимущества сварки с ДГП выявлены по формированию химического и фазового состава шва [3–5], поскольку в состав ДГП, в отличие от электрода, возможно ввести практические любые легирующие и модифицирующие добавки и значительно уменьшить их потери и дезактивацию при сварке с вводом ДГП, минуя стадию дуги (Т = 6000 ℃) и стадию капельного переноса (Тк ≤ 3500 ℃) [4]. Кроме этого, повышается высота наплавленного слоя, что позволяет сократить число проходов и существенно повысить производительность многослойной сварки (коэффициент наплавки αН > 20 %).

При сварке высокопрочных сталей, склонных к закалке, основными сложностями являются склонность МШ и зоны термического влияния (ЗТВ) к появлению холодных (ХТ) и горячих (кристаллизационных) трещин (ГТ), а также обеспечение равнопрочных ОМ сварных соединений [1]. Импульсно-дуговая сварка в защитных газах с ДГП позволяет снизить долю участия ОМ в МШ за счет повышения гидростатического давление жидкого металла и высоту

наплавки, уменьшить тепловложение в ОМ и протяженность ЗТВ. Эти факторы благоприятно влияют на свариваемость и повышают технологическую прочность сварных соединений.

Для проведения исследований была разработана установка для сварки с ДГП [2], схема которой представлена на рис. 1.

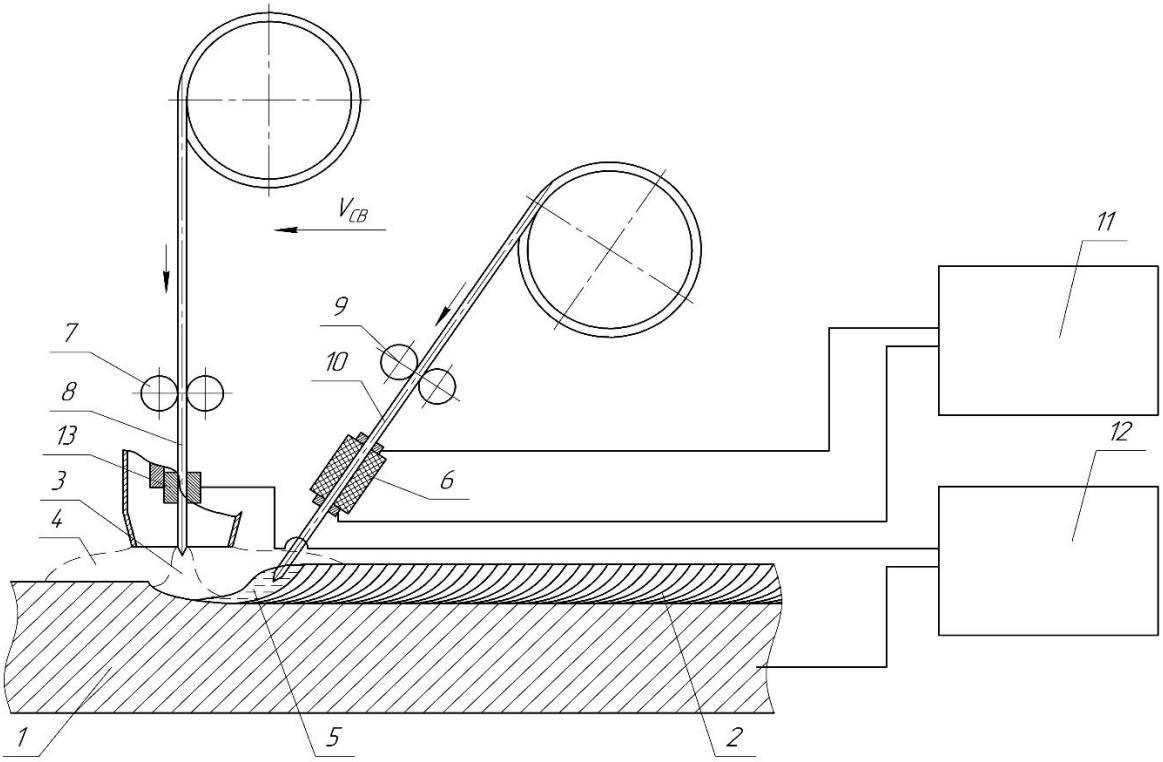


Рис. 1. Схема установки: 1 – ОМ, 2 – МШ, 3 – дуга, 4 – защитный газ, 5 – сварочная ванна, 6 – подогревающий элемент, 7 – подающий механизм проволоки, 8 – проволока, 9 – подающий механизм для ДГП, 10 – ДГП, 11 – источник питания для ДГП, 12 – основной источник питания, 13 – контактный наконечник [2]

Принципиальным отличием этой схемы процесса сварки с ДГП по сравнению со схемой, представленной в работе [4], является косвенный нагрев ДГП и применение импульсного режима сварки. Такой нагрев и режим сварки позволяет регулировать тепловложение в больших интервалах, чем при традиционной дуговой сварке. Это позволяет изменять скорость охлаждения кристаллизуемого МШ и ЗТВ в большем диапазоне, что способствует получению в околошовной зоне структур, обладающих повышенной сопротивляемостью ХТ и получить ТЦС, близкий к «идеальному». Также данный способ нагрева исключает возможность дугообразования на конце подаваемой в сварочную ванну проволоки при сварке.

При сварке в качестве основной и присадочной проволоки применялась порошковая проволока со структурой метастабильного аустенита. Материалы с метастабильными структурами, способными под влиянием внешних

воздействий к самоорганизации (TWIP-TRIP аустенитные стали), являются перспективными материалами.

1. Березовский А.В., Смоленцев А.С., Шалимов М.П., Смоленцев М.С., Балин А.Н. Современное состояние и проблемы свариваемости высокопрочных закаливающихся сталей // Тяжелое машиностроение. 2021. № 7–8. С. 2–9.
2. Смоленцев М. С., Коробов Ю. С. Повышение производительности и качества сварных соединений из высокопрочных сталей, выполненных импульсно-дуговой сваркой с дополнительной горячей присадкой // Актуальные проблемы развития технических наук: сборник статей участников XXIV Областного конкурса научно-исследовательских работ «Научный Олимп» по направлению «Технические науки» / Министерство образования и молодежной политики Свердловской области; ГАУ СО «Дом молодежи»; ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина». Екатеринбург: Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, 2021. С. 123-129.
3. Якушин Б.Ф., Сударев А.В. Анализ эффективности ввода дополнительной горячей присадки при дуговой наплавке закаливающихся сталей // Сварка и диагностика. 2007. № 1. С. 4–5.
4. Алешин Н.П., Якушин Б.Ф., Коберник Н.В. и др. Совершенствование процесса сварки хладостойких сталей путем оптимизации баланса тепловой энергии дугового источника // Сварочное производство. 2018. № 10. С. 3–13.
5. Влияние дополнительной присадочной проволоки на структурные изменения в шве высокопрочной стали при импульсной дуговой сварке в газах / Ю. С. Коробов, Ю. С. Давыдов, Л. Ю. Егорова [и др.] // Современные материалы и передовые производственные технологии (СМППТ-2021): Сборник тезисов Международной научной конференции, Санкт-Петербург, 21–23 сентября 2021 года. Санкт-Петербург: Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого», 2021. С. 66-67.

СТРУКТУРА И ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТРОЙНОГО Cu/Al/Mg-КОМПОЗИТА

Калонов А.А.[1], Сухачев П.В.[2], Волков А.Ю.[1]
[1)] Институт физики металлов УрО РАН им. М.Н. Михеева, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: kalonov@imp.uran.ru

STRUCTURE AND PHYSICO-MECHANICAL PROPERTIES OF THE TERNARY Cu/Al/Mg-COMPOSITE

Kalonov A.A.[1], Sukhachev P.V.[2], Volkov A.Yu.[1]
[1)] M.N. Mikheev Institute of Metal Physics of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia
[2)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Ternary composite based on Cu-Al-Mg was obtained by hydroextrusion. To analyze the effect of interfaces on the properties of a composite, specimens with different heat treatments were studied. The mechanical and electrical properties of the composites have been studied.

Получение высокопрочных проводников электрического тока является важной научно-практической задачей. Одним из путей решения этой проблемы является создание многокомпонентных композитных материалов на основе меди. Полученные нами ранее бинарные Cu/Mg-композиты, а также тройной Al/Cu/Mg-композит с наружной Al-матрицей показали, что такой подход позволяет существенно повысить физико-механические свойства [1, 2]. Цель данной работы состояла в получении и изучении свойств тройного Cu/Al/Mg-композита, внутри медной оболочки которого находится Al-матрица с большим количеством тонких Mg-волокон.

Для проведения исследования методом гидроэкструзии был изготовлен пруток Cu/Al/Mg-композита. На первом этапе был получен бинарный Al/Mg-композит [3]. Для этого в пруток из алюминиевого сплава АМг2 было вставлено 7 Mg-стержней, который затем экструдировался до получения проволоки диаметром 0,5 мм. Затем 420 отрезков проволоки из этого композита было вставлено в Cu-оболочку. Полученная заготовка тройного Cu/Al/Mg-композита также подвергалась экструзии до получения тонких прутков и проволок. Таким образом, исследуемый композит состоит из внешней Cu-оболочки, внутри которого находятся 2940 Mg-волокон в Al-матрице. Содержание компонентов в полученном тройном композите представлено на рисунке 1.

Объемная доля компонентов, %			Массовая доля компонентов, %			Атомная доля компонентов, %		
Cu	Al	Mg	Cu	Al	Mg	Cu	Al	Mg
50,7	42,1	7,2	78,1	19,7	2,2	60,1	35,6	4,3

Рис. 1. Содержание компонентов в Cu/Al/Mg-композите

Установлено, что при термообработках ниже 450°C на интерфейсах композита происходят диффузионно-контролируемые твердотельные реакции. Нагрев выше 450°C приводит к постепенному плавлению компонентов и образованию эвтектик. Показано, что отжиги вызывают рост микротвердости на Cu/Al- и Al/Mg-интерфейсах ввиду формирования на них интерметаллических соединений. Образование интерметаллидов также приводит к повышению электросопротивления отожженных образцов. Механические испытания на растяжение показали, что свойства тройного Cu/Al/Mg-композита определяются высокопрочной, но хрупкой сердцевиной, сформированной на основе сложного сочетания интерметаллических соединений алюминия, магния и меди. В деформированном состоянии предел текучести композита составляет $\sigma_{0,2}$=404 МПа, а его удлинение до разрушения составляет δ=1%. В результате отжига при 650°C предел текучести образцов снижается до 100 МПа, пластичность возрастает до 15%. Сделан вывод, что свойства исследованного композита в основном определяются внешней медной оболочкой, а высокопрочная, но хрупкая сердцевина теряет свою целостность в ходе испытаний на растяжение. В то же время, для достижения повышенных прочностных свойств композитных материалов необходимо достичь в них совместной работы пластичной матрицы и высокопрочной армирующей фазы [4].

По результатам работы установлено, что в тройном Cu/Al/Mg-композите оптимальное взаимодействие матрицы и сердцевины не было достигнуто. Для повышения функциональных свойств Cu/Al/Mg-композита необходимо увеличить содержание в нем меди, оптимальным является создание медной сетки в Al/Mg-сердцевине.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки РФ "Давление" № 122021000032-5.

1. Abnormally high strength and low electrical resistivity of the deformed Cu/Mg-composite with a big number of Mg-filaments / A.Yu. Volkov, B.D. Antonov, E.I. Patrakov, E.G. Volkova, D.A. Komkova, A.A. Kalonov, A.V. Glukhov // Materials & Design. – 2020. – Vol. 185. – P. 108276(12).
2. Abnormally high strength and low electrical resistivity of the deformed Cu/Mg-composite with a big number of Mg-filaments / A.Yu. Volkov, B.D. Antonov, E.I.

Patrakov, E.G. Volkova, D.A. Komkova, A.A. Kalonov, A.V. Glukhov // Materials & Design. – 2020. – Vol. 185. – P. 108276(12).
3. Development, structure and properties of Cu/Mg and Al/Mg composite wires / A. Kalonov, A. Glukhov, A.Yu. Volkov // Procedia Manufacturing. – 2020. – Vol. 50. – P. 800 – 803.
4. Композиционные материалы на основе алюминиевых сплавов, армированных углеродными волокнами / Костиков В.И., Варенков А.Н. – М.: Интермет Инжиниринг, 2000. – 445 с.

ДОПИРОВАННЫЕ НИКЕЛАТЫ ЛАНТАНА КАК КАТОДНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ТОТЭ

Суханов К.С.[1], Гилев А.Р.[1], Киселев Е.А.[1], Черепанов В.А.[1]
[1)] Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: kirill.sukhanov@urfu.ru

DOPED LANTHANUM NICKELATES AS A CATHODE FOR SOLID OXIDE FUEL CELLS

Sukhanov K.S.[1], Gilev A.R.[1], Kiselev E.A.[1], Cherepanov V.A.[1]
[1)] Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia

$La_{1.4}A_{0.6}Ni_{0.6}Fe_{0.4}O_{4+\delta}$ (A=Ca, Sr, Ba; LANF0604) were synthesized via citrate-nitrate method. Total conductivity (σ) of LANF0604 shows little variation versus the radius of dopant (≈30 S/cm at 800 °C). The lowest polarization resistance of 0.42 Ω cm^2 was obtained for A=Ba at 800 °C.

Твердые растворы на основе никелата лантана $La_2NiO_{4+\delta}$ со структурой типа K_2NiF_4 могут найти потенциальное применение в качестве катодных материалов для твердооксидных топливных элементов (ТОТЭ) на основе кислород- [1,2] и протонпроводящих [3,4] электролитов.

Синтез образцов $La_{1.4}A_{0.6}Ni_{0.6}Fe_{0.4}O_{4+\delta}$ (A=Ca, Sr, Ba; LANF0604) проводили с использованием цитратно-нитратной технологии. Фазовый состав и кристаллическую структуру образцов исследовали методом рентгенофазового анализа (РФА). Для измерения общей удельной электропроводности (σ) использовали четырехконтактный метод на постоянном токе. Спектры импеданса симметричных ячеек LANF0604 (A=Ca, Sr, Ba)/ $Ce_{0.8}Sm_{0.2}O_{2-\delta}$ (SDC) были получены двухконтактным методом в интервале частот от 300 кГц до 1 мГц с амплитудой сигнала 20 мВ в интервале температур 600-800 °C на воздухе. Полученные годографы импеданса исследованных симметричных ячеек были использованы для расчета функций распределения времен релаксации с использованием регуляризации Тихонова.

Результаты РФА показали, что исследуемые сложные оксиды были получены однофазными, а их кристаллическая структура была описана в рамках тетрагональной симметрии, пр. гр. I4/mmm, структурный тип K_2NiF_4. Общая электропроводность (σ) исследованных оксидов увеличивается при повышении температуры во всем исследуемом интервале температур и практически не зависит от размера катиона щелочноземельного металла (σ≈30 См/см при 1000°C). Энергия активации электропроводности для исследованных оксидов варьировалась в диапазоне 16.5-16.9 кДж/моль. Анализ функций распределения времен релаксации при различных температурах указывает на то, что в полученных спектрах импеданса можно выделить не менее 3 вкладов для ячеек

LCNF0604 и LBNF0604. Для ячейки LSNF0604 – не менее 4 вкладов. Поэтому аппроксимацию спектров импеданса осуществляли с использованием эквивалентной схемы, состоящей из последовательно соединенных сопротивления электролита R_1 и трех/четырех R_i-CPE элементов. Полученные в результате обработки спектров импеданса значения емкостей и энергий активаций указывают на то, что данные вклады могут быть отнесены к следующим процессам: 1) перенос заряда через межфазную границу электрод/электролит (R_2); 2) перенос заряда через межфазную границу электрод/коллектор тока (R_3); 3) перенос заряда – ионная диффузия в электродном материале (R_4); 4) поверхностный кислородный обмен на границе электрод/газовая фаза (R_5). Основной вклад в поляризационное сопротивление всех исследуемых ячеек в интервале температур 600-800 °C вносит перенос заряда – ионная диффузия в электродном материале. Поляризационное сопротивление (R_p) электродов LCNF0604, LSNF0604 и LBNF0604 при 800 °C составило 1.85, 2.61 и 0.42 Ω см^2, соответственно.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (FEUZ-2023-0016).

1. Sayers R, Rieu M., Lenormand P., Ansart F. Development of lanthanum nickelate as a cathode for use in intermediate temperature solid oxide fuel cells. Solid State Ionics. 192, 531-534 (2011)
2. Zhao H., Mauvy F., Mauvy C., Bassat J. M. New cathode materials for ITSOFC: phase stability, oxygen exchange and cathode properties of $La_{2-x}NiO_{4+\delta}$. Solid State Ionics. 179, 2000-2005 (2008)
3. Gilev A. R., Kiselev E. A., Malyshkin D. A., Sukhanov K. S., Cherepanov V. A. Hydration effect on properties of the $La_{2-x}A_xNi_{1-y}Fe_yO_{4+\delta}$ (A=Ca, Sr) cathode materials for H^+-SOFCs. J. Alloys Compd. 860, 158452 (2020)
4. Dailly J., Fourcade S., Largeteau A., Mauvy F. Perovskite and A_2MO_4 – type oxides as new cathode materials for protonic solid oxide fuel cells. Electrochemica Acta. 55, 5847-5853 (2010)

ИЗУЧЕНИЕ ВНУТРЕННЕЙ СТРУКТУРЫ И МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ НАНОЧАСТИЦ НА ОСНОВЕ БИНАРНЫХ СПЛАВОВ FeMe@C (Me=Co,Ni) МЕТОДОМ ЯМР

Суворкова Е.В.[1], Гермов А.Ю.[2], Прокопьев Д.А.[2], Конев А.С.[2], Уймин М.А.[1, 2], Минин А.С.[1, 2], Ермаков А.Е.[1, 2], Голобородский Б.Ю.[2], Курмачёв И.А.[2]

[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

[2)] Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: e.v.suvorkova@mail.ru

STUDY OF THE INTERNAL STRUCTURE AND MAGNETIC PROPERTIES OF NANOPARTICLES BASED ON FeMe@C (Me=Co,Ni) BINARY ALLOYS BY NMR

Suvorkova Ye.V.[1], Germov A.Yu.[2], Prokopyev D.A.[2], Konev A.S.[2], Uimin M.A.[1, 2], Minin A.S.[1, 2], Yermakov A.E.[1, 2], Goloborodskiy B.Yu.[2], Kurmachev I.A.[2]

[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russian Federation

[2)] Mikheev Institute of Metal Physics of Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russian Federation

FeMe@C (Me=Co,Ni) nanoparticles were synthesized by the gas-phase method, some of them were annealed to increase the magnetization. ^{59}Co, ^{61}Ni and ^{57}Fe NMR spectra were obtained. By annealing, it is possible to obtain a structurally ordered phase of the FeCo alloy in the core of the particles.

Интерес к изучению бинарных сплавов FeMe@C (Me=Co,Ni) обусловлен их широким применением в биомедицинской и клинической областях [1,2]. Защитное покрытие тонкой углеродной пленкой обеспечивает устойчивость частиц к окислению при воздействии окружающей среды. Использование локальных методов, таких как ЯМР, позволяет изучать наноскопические структурные и магнитные особенности образцов.

Наночастицы FeMe@C (Me=Co,Ni) были получены методом газофазного синтеза [3]. С целью обеспечения однородности ядра частиц был проведён отжиг при температуре 540ºC в течение 4 часов.

Была проведена аттестация образов FeCo@C на основе ПЭМ-изображений. На основе кольцевых дифракционных картин были получены межплоскостные расстояния для образца $Fe_{0.66}Co_{0.34}$@C.

В работе были получены и проанализированы спектры ^{59}Co, ^{61}Ni и ^{57}Fe ЯМР для сплавов с различными концентрациями железа, помимо этого исследованы результаты измерения рентгеновской дифракции, эффективной поверхности и

магнитной восприимчивости, дилатометрии, а также химический анализ образцов.

Согласно полученным данным, средний размер наночастиц сплава FeCo@C составляет 7 нм, наибольшее значение намагниченности (160 emu/g) достигается при концентрациях $Fe_{0.66}Co_{0.34}$@C. Отжиг наночастиц увеличил их размер до 9 нм, а также позволил получить наибольшее значение намагниченности насыщения (189 emu/g) для данного образца.

Спектры ^{59}Co ЯМР сплава Fe_xCo_{1-x}@C (x=0.4– 0.8) сильно уширены и представляют собой суперпозицию сигналов, соответствующих атомам кобальта с различным количеством атомов железа в ближайшем окружении. Спектры наночастиц с большей концентрацией железа смещаются в область больших частот. После отжига ЯМР спектр наночастиц $Fe_{0.66}Co_{0.34}$@C соответствует спектру упорядоченного сплава [4] с α_2-фазой. На основе спектров ^{57}Fe ЯМР была определена более детальная картина о распределении локальных полей и количестве атомов кобальта в окружении железа.

Результаты ^{61}Ni ЯМР сплавов Fe_xNi_{1-x}@C (x=0.25– 0.75) аналогично представляют собой сильно уширенные линии. Распределение полей можно описать биноминальным распределением атомов железа и никеля в ГЦК решетке.

Работа выполнена в рамках проекта РНФ № 21-72-00007.

1. Першина, А. Г., Алексей Эдуардович Сазонов, Виктор Дмитриевич Филимонов. "Взаимодействие магнитных наночастиц и молекул ДНК: создание нанобиогибридных структур и их использование." Успехи химии 83.4 (2014): 299-322.
2. Hütten, Andreas, et al. "New magnetic nanoparticles for biotechnology." Journal of Biotechnology 112.1-2 (2004): 47-63.
3. Tsurin V. A., et al., Physics of the Solid State 56, 287 (2014)
4. Serikov.V.V., et.al., The Physics of Metals and Metallography 118(11), 1093-1101 (2017)

АЛЬТЕРНАТИВНЫЕ КРИТЕРИИ ОЦЕНКИ КОРРОЗИОННЫХ РАЗРУШЕНИЙ ПОСЛЕ ВЫДЕРЖКИ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ В РАСПЛАВАХ СОЛЕЙ

Трубченинова А.И.[1,] Абрамов А.В.[1], Алимгулов Р.Р.[1], Половов И.Б.[1], Ребрин О.И.[1]

[1)] Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: atrubcheninova@gmail.com

ALTERNATIVE CRITERIA FOR EVALUATION OF CORROSION DESTRUCTIONS AFTER AN EXPOSITION OF METALIC MATERIALS IN MOLTEN SALTS

Trubcheninova A.I.[1], Abramov A.V.[1], Alimgulov R.R.[1], Polovov I.B.[1], Rebrin O.I.[1]

[1)] Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia

Alternative criteria for evaluating corrosion processes are formulated. Calculation methods for quantitative determination of suggested criteria have been developed. Also proposed criteria were applied to real corrosion tests, revealed their effectiveness and adequacy.

На сегодняшний день поиск конструкционных материалов, сохраняющих приемлемую коррозионную стойкость в расплавах солей, является актуальной задачей. Качественные характеристики коррозионных процессов исследованы неоднократно, что также отображено в имеющихся на настоящий момент нормативных документах [1]. Однако, до сих пор не сформулирован общий подход к количественной оценке коррозионных поражений в расплавах солей. В данной работе предлагаются альтернативные критерии количественного определения коррозионных разрушений, а также разработаны методики их расчёта. Предложены альтернативные способы оценки межкристаллитной коррозии, более полно характеризующие данный тип коррозионного поражения. Описан способ оценки неравномерности сплошного характера разрушения металлических материалов.

Показана эффективность разработанных критериев в реальных исследованиях. Коррозионные испытания проводились в расплавах солей на основе эвтектической смеси LiF-NaF-KF при температуре 650 °C в течение 100 часов, испытуемые материалы – никель-молибденовые и молибденовые сплавы.

1. ГОСТ 9.908-85 «Единая система защиты от коррозии и старения. Металлы и сплавы. Методы определения показателей коррозии и коррозионной стойкости».

ПОЛУЧЕНИЕ ПОРОШКОВ НА ОСНОВЕ ДИОКСИДА ЦИРКОНИЯ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ ЭЛЕКТРОПРОВОДЯЩИХ СВОЙСТВ КЕРАМИКИ

Вандышева П.И.[1], Хорошавцева Н.В.[1], Беспоместных Ю.А.[1], Денисова Э.И.[1], Карташов В.В.[1], Меркулов О.В.[2]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Институт химии твердого тела УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: polinavandyseva@gmail.com

PRODUCTION OF POWDERS BASED ON ZIRCONIUM DIOXIDE TO STUDY THE ELECTRICAL CONDUCTIVITY PROPERTIES CERAMICS

Vandysheva P.I.[1], Khoroshavtseva N.V.[1], Bespomestnykh J.A.[1], Denisova E. I.[1], Kartashov V.V.[1], Merkulov O.V.[2]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia
[2)] Institute of Solid State Chemistry of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia

Zirconium dioxide powders with different content of stabilizing additives Y_2O_3 and Sc_2O_3 were used for the manufacture of ceramic samples in order to further study their electrical conductivity. The resulting ceramics are intended as potential materials for electrolytes of high temperature SOFC.

Материалы твёрдых электролитов на основе полностью или частично стабилизированного диоксида циркония на сегодняшний день являются наиболее исследованными и востребованными для практического применения. Допирование приводит к образованию кислородных вакансий и, как следствие, к появлению значимой кислород-ионной проводимости.

Методом обратного осаждения аммиачным раствором были синтезированы порошки диоксида циркония, стабилизированные оксидами иттрия и скандия различного состава. Из полученных порошков были спрессованы таблетки диаметров 8 мм. Далее проводили исследования как порошков, так и спрессованных твердых образцов.

По рентгенофазовому анализу было определено, что преобладает тетрагональная структура. Измеряли электропроводность образцов двухзондовым методом на переменном токе при частоте 20 кГц в интервале 873–1173 К. Результаты измерений представлены на рисунке. По полученной зависимости видно, что образец с составом ZrO_2 – 1 мол.% Y_2O_3 – 8 мол.% Sc_2O_3 обладает более высокой электропроводностью. Можно сделать вывод, что с увеличением количества оксида скандия увеличивается и электропроводность. В дальнейшем планируется подвергнуть керамику старению в течение 1000 часов при температуре 950℃, после чего повторно провести исследования.

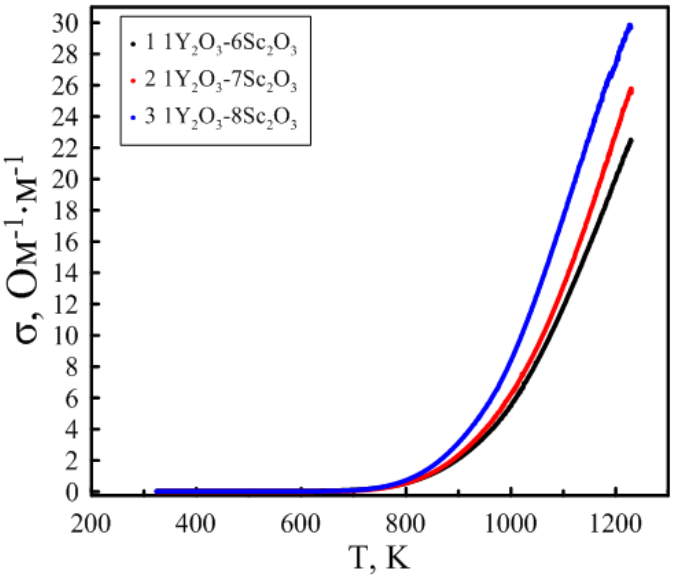


Рис. 1. Температурная зависимость удельной электропроводности.

НОВЫЕ СОДОПИРОВАННЫЕ СЛОИСТЫЕ ПЕРОВСКИТЫ НА ОСНОВЕ $BaLa_2In_2O_7$: СИНТЕЗ И ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА

Веринкина Е.М.[1], Абакумова Е.В.[1, 2], Бедарькова А.О.[1, 2], Тарасова Н.А.[1, 2], Анимица И.Е.[1, 2]

[1)] Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия

[2)] Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: evgeniaverinkina@yandex.ru

NEW DOPED LAYERED PEROVSKITES BASED ON $BaLa_2In_2O_7$: SYNTHESIS AND TRANSPORT PROPERTIES

Verinkina E.M.[1], Abakumova E.V.[1, 2], Bedarkova A.O.[1, 2], Tarasova N.A.[1, 2], Animitsa I.E.[1, 2]

[1)] Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia

[2)] The Institute of High Temperature Electrochemistry of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russia

This paper devoted to the synthesis and investigation of physico-chemical properties of solid solutions based on perovskite $BaLa_2In_2O_7$. The solid state synthesis of strontium and gadolinium doped samples were realized. Structure, phase composition and proton conductivity were investigated.

На сегодняшний день, задачи, лежащие в области водородной энергетики, являются весьма значимыми для современного неорганического материаловедения и электрохимической энергетики. Будучи экологически чистым и достаточно доступным, водородное топливо представляет собой объект интереса многих ученых. Для создания протон-проводящих топливных элементов необходимо, в том числе, синтезировать электролиты с высоким уровнем протонной проводимости.

В связи с этим большого внимания заслуживают слоистые перовскиты со структурой Радлесдена-Поппера с общей формулой $A_{(n-1)}A'_2B_nX_{(3n+1)}$. Распространенным способом получения материалов данной структуры с улучшенными транспортными свойствами является метод гетеровалентного допирования. Наряду с этим, для данных структур было показано, что на подвижность ионных носителей (в том числе, протонов) значимое влияние оказывает радиус допанта [1]. Комбинируя влияние геометрического фактора (радиуса допанта) с типом разупорядочения (гетеровалентное допирование), можно добиться значительного повышения протонной проводимости.

Рассмотренные в данной работе соединения были получены методом твердофазного синтеза. Исходные образцы (оксиды и карбонаты) были предварительно прокалены вследствие высокой гигроскопичности. Последующий синтез соединений проводился на воздухе при ступенчатом

повышении температуры в интервале 800 − 1300°C с промежуточными перетираниями в агатовой ступке в среде спирта.

Целью данной работы является установление области гомогенности полученного твердого раствора, а также установление зависимости изменения электропроводности от содержания допантов в исходной фазе $BaLa_2In_2O_7$. Методом импедансной спектроскопии были исследованы электрические свойства фаз в широком диапазоне температур (300–900°C) при различных значениях парциальных давлений паров воды. По полученным результатам проведенных исследований были сделаны выводы о влиянии содержания допанта на протонную проводимость и процессы гидратации.

1. Tarasova N. A., Animitsa I. E.. Materials $A^{II}LnInO_4$ with Ruddlesden-Popper structure for electrochemical applications: Relationship between ion (oxygen-ion, proton) conductivity, water uptake, and structural changes.//Materials 2022, 15(1), 114;

ВЛИЯНИЕ ЗАМЕЩЕНИЯ А-КАТИОНА НА СТАБИЛЬНОСТЬ ГИБРИДНЫХ ПЕРОВСКИТОВ К МОЩНЫМ ПОТОКАМ ЭЛЕКТРОНОВ

Расметьева А.В.[1], Воробьев С.Т.[1], Озерова В.В.[2], Кухаренко А.И.[1], Сарычев М.Н.[1], Трошин П.А.[2], Жидков И.С.[1]
[1)] Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия
[2)] ФИЦ ПХФ и МХ РАН, г. Черноголовка, Россия
E-mail: erinoo2017@gmail.com

THE EFFECT OF A-CATION SUBSTITUTION ON THE STABILITY OF HYBRID PEROVSKITES UNDER POWERFUL ELECTRON FLUXES

Rasmetyeva A.V.[1], Vorobyev S.T.[1], Ozerova V.V.[2], Kukharenko A.I.[1], Sarychev M.N.[1], Troshin P.A.[2], Zhidkov I.S.[1]
[1)] Ural federal university, Ekaterinburg, Russia
[2)] FRC PCP and MC RAS, Chernogolovka, Russia

Perovskites with A-cation substitution $APbI_3$ (where A= MA, FA, $Cs_{0.12}FA_{0.88}$, $Cs_{0.1}MA_{0.15}FA_{0.75}$) were studied by XRD analysis, XPS, UV-VIS, PL spectroscopy, AFM, SEM. Perovskites with A = $Cs_{0.12}FA_{0.88}$ and FA have shown remarkable stability under electron irradiation.

В последние годы большое внимание уделяется органо-неорганическим гибридным галогенидным перовскитам как перспективным материалам для фотовольтаики в связи с их высокой эффективностью, простотой получения, низкой себестоимостью и исключительными оптическими характеристиками [1]. Однако, активные слои в основном состоят из однокатионных компонентов с плохой стабильностью, таких как $MAPbI_3$ и $FAPbI_3$. Замещение А-катиона может улучшить оптическое поглощение пленок перовскита, уменьшить плотность состояния ловушки в пленках и повысить внутреннюю структурную и термическую стабильность материалов [2]. Применение перовскитных солнечных элементов имеет большой потенциал в космической технике. При этом важнейшим фактором в условиях космоса может оказаться воздействие излучения космических частиц. В данной работе мы рассматриваем влияние частичного замещения А-катиона на стабильность гибридных перовскитов к мощным потокам электронов.

В работе методами РФА, РФЭС, ФЛ, СЭМ, АСМ исследованы образцы после облучения флюенсами электронов от 10^{14} до 10^{16} е/см^2.

Фотолюминесценция пленок $FAPbI_3$ и $(CsFA)PbI_3$ быстро тушится с увеличение дозы электронов, что свидетельствует о появлении глубоких ловушек в результате радиационного повреждения материала. В случаях $MAPbI_3$ и $(CsMAFA)PbI_3$ наблюдается более медленный характер падения интенсивности

фотолюминесценции, что связано с присутствием в их структуре катионов метиламмония, способствующих залечиванию дефектов.

Согласно данным РФА, наименее устойчивыми к облучению ускоренными электронами являются материалы, содержащие в своем составе катионы метиламмония. Для дальнейших исследований наиболее перспективны системы, содержащие одновалентные катионы формамидиния и/или цезия.

У всех пленок, облученных быстрыми электронами, не наблюдается уменьшения I:Pb отношения с дозой облучения, что исключает формирование PbI_2 как продукта фотохимического разложения. Также не просматривается систематическое уменьшение и N:Pb отношения, что не указывает на выделение металлического свинца.

Анализ XPS N 1s-спектров показывает, что облучение мощными потоками быстрых электронов $MAPbI_3$ и $CsMAFAPbI_3$ перовскитов приводит к их частичному разложению, что сопровождается появлением дополнительных элементов структуры, вклад которых нарастает с дозой облучения. Этот эффект гораздо менее выражен в случае $CsFAPbI_3$ и $FAPbI_3$.

Таким образом, исследование устойчивости $APbI_3$ перовскитов к облучению мощными потоками быстрых электронов с энергией 8,5 МэВ показало, что фотохимическая деградация наблюдается для $MAPbI_3$ и $CsMAFAPbI_3$ перовскитов, тогда как $CsFAPbI_3$ и $FAPb_I3$ продемонстрировали замечательную устойчивость вплоть до флюенсов порядка 10^{16} $см^{-2}$.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 22-61-00047.

1. J. Berry et al., Adv. Mater. 27, 5102 (2015).
2. J. Gong et al., Energy Chem.27, 1017 (2018).

ВЛИЯНИЕ ТЕХНОЛОГИИ ИЗГОТОВЛЕНИЯ ПОЛИЭТИЛЕНА ВЫСОКОЙ ПЛОТНОСТИ С ДОБАВЛЕНИЕМ ПУЦЦОЛАНЫ И МУКИ ИЗ ОЛИВКОВЫХ ВЫЖИМОК НА ЕГО РАДИАЦИОННО-ЗАЩИТНЫЕ СВОЙСТВА

Воронин И. П.[1], Ширина А.М.[1], Ташлыков О.Л.[1], Аладаилах М.В.[1]
[1)] Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: ilya_10_voronin@mail.ru

THE INFLUENCE OF HIGH-DENSITY POLYETHYLENE MANUFACTURING TECHNOLOGY WITH THE ADDITION OF POZZOLANA AND OLIVE POMACE FLOUR ON ITS RADIATION-PROTECTIVE

Voronin I.P.[1], Shironina A.M.[1], Tashlykov O.L.[1], Aladailah M.W.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The influence of the content of high-density polyethylene manufacturing technology with the addition of pozzolana and olive pomace flour on its radiation-protective properties was evaluated

Широкое применение ядерной энергии во многих областях промышленности, науке, медицине актуализирует исследования по поиску новых высокоэффективных и нетоксичных материалов радиационной защиты.

Оптимизация эффективного состава радиационно-защитных материалов может быть использована для реализации принципов оптимизации радиационной защиты персонала [1]. Высокая защитная способность свинца и бетона от ионизирующего излучения делает их традиционными защитными материалами. Но токсичность свинца, а также растрескивание бетона затрудняют их использование в качестве материалов для защиты от радиации. Разработка таких материалов, способных эффективно ослаблять ионизирующее излучение, стала возможной благодаря использованию полимерных матриц.

В области радиационной защиты полимерные композитные материалы представляют большой интерес благодаря невысокой плотности, малой стоимости и способности ослаблять излучение.

На кафедре атомных станций УрФУ ведется активное сотрудничество в этой области с зарубежными университетами. Взаимодействие с аспирантами из Саудовской Аравии, Иордании, Египта и других стран позволяет объединить научно-исследовательскую базу и интенсифицировать проведение исследований.

С целью поиска новых составов радиационной защиты были исследованы некоторые природные материалы и отходы промышленного производства. Исследованные полимерные композиты были приготовлены из полиэтилена высокой плотности в качестве матрицы, пуццоланы и муки из оливковых

выжимок в качестве наполнителей. Пуццолана была получена из разных штатов северных регионов Иордании, а остатки процесса производства оливкового масла, известные как оливковая выжимка, были получены на Иорданском прессовом заводе. При получении композитов некоторые образцы были изготовлены с использованием ультразвукового воздействия, что вызвало увеличение плотности образцов при одинаковых концентрациях на 25%, что оказало положительное влияние на линейный коэффициент ослабления. Исследуя влияние содержания пуццоланы и муки из оливковых выжимок в полимере, выяснилось, что наиболее эффективным для ослабления гамма-излучения оказался образец с содержанием 30% пуццоланы и 10% оливковой муки.

1. А. Ф. Михайлова, О.Л. Ташлыков, Пути реализации принципа оптимизации в радиологической защите персонала // Ядерная физика и инжиниринг, - 2018, том 9, № 4, с. 393–401.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ЭКСТРУЗИИ ИНФРАКРАСНЫХ СВЕТОВОДОВ НА ОСНОВЕ ГАЛОГЕНИДОВ СЕРЕБРА И ТАЛЛИЯ (I)

Южаков И.В.[1], Салимгареев Д.Д.[1], Южакова А.А.[1], Жукова Л.В.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: Iuzhackov.ivan@yandex.ru

SIMULATION OF EXTRUSION PROCESS OF INFRARED FIBERS BASED ON SILVER AND THALLIUM (I) HALIDES

Yuzhakov I.V.[1], Salimgareev D.D.[1], Yuzhakova A.A.[1], Zhukova L.V.[1]
[1)] Ural federal university named after first President of Russia B.N. Yeltsin, Ekaterinburg, Russia

To optimize extrusion process of infrared fibers based on silver and thallium (I) halides, a computer simulation using the finite element method is proposed. As a modeling result, the optimal values of the plunger speed and billet temperature were selected.

Технология изготовления волоконных световодов из монокристаллов и оптической керамики на основе твердых растворов галогенидов серебра и таллия включает несколько стадий. На первом этапе из монокристалла или двухфазной оптической керамики путем химико-механической обработки изготавливается цилиндрическая заготовка. Далее она помещается в контейнер, который устанавливается совместно с фильерами, удерживающими и вспомогательными элементами в гидравлический пресс. Контейнер с заготовкой окружаются нагревательным кожухом. На третьем этапе проводится непосредственно сам процесс экструзии, когда при постоянной скорости движения плунжера пресса производится равномерное перемещение заготовки через фильеру с образованием волоконного световода.

Ранее при изготовлении ИК световодов параметры экструзии определялись исключительно на основании фазовой диаграммы и экспериментальных данных. Это приводило к снижению эффективности технологии изготовления и большой продолжительности подготовительных работ. Для оптимизации процесса было предложено ввести моделирование экструзии световода по методу конечных элементов, которое позволяет провести теоретически обоснованный подбор температуры и скорости экструзии, обеспечивающий получение однородных по длине световодов. Это существенно сокращает временные и материальные затраты на разработку и производство волоконных световодов из новых оптических материалов.

Научной лабораторией волоконных технологий и фотоники ХТИ УрФУ были разработаны монокристаллы и оптическая керамика на основе систем $AgCl_{0,25}Br_{0,75}$ – $TlCl_{0,74}Br_{0,26}$ и $AgCl_{0,25}Br_{0,75}$ – $TlBr_{0,46}I_{0,54}$. Данные материалы

перспективны для изготовления волоконных световодов, поскольку наличие галогенидов серебра обеспечивает высокую пластичность материала и позволяет избежать рекристаллизации зерен, а галогениды таллия способствуют высокой фотостойкости и устойчивости к β- и γ-облучению [1].

Моделирование экструзии ИК световодов выполнялось на основе монокристаллов указанных систем в программе Comsol Multiphysics [2]. В качестве заготовки принимался цилиндр диаметром 8 мм, высотой 20 мм, а для изготовления волокна использовалась фильера диаметром 455 мкм. При моделировании были использованы законы трех разделов физики: ламинарного истечения, теплопередачи и механики твердого тела. Для оптимизации расчета использовалась четверть геометрии оснастки, заготовки и световода, что возможно благодаря осевой симметрии объектов. Скорости и температуры задавались в рамках диапазонов 0,2-1,0 мм/мин и 180-200 ºС с шагом 0,2 мм/мин и 5 ºС соответственно.

В результате моделирования для разных составов были определены оптимальные скорость движения плунжера и температура заготовки, обеспечивающие качественную структуру световодов. В частности, для состава 5 мас. % $TlCl_{0,74}Br_{0,26}$ в $AgCl_{0,25}Br_{0,75}$ это 0,2 мм/мин и 200 ºС. Таким образом моделирование обеспечивает оптимизацию процесса экструзии и позволяет анализировать как параметры процесса, так и качество получаемых световодов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-73-10108, https://rscf.ru/project/21-73-10108/.

1. Salimgareev D., Lvov A., Yuzhakova A., Shatunova D., Belousov D., Korsakov A., Zhukova L. Investigation of the TlBr0.46I0.54 – AgI phase diagram within the AgBr – AgI – TlBr – TlI system for optical materials synthesis, Optical Materials, 125, 112124, (2022).
2. COMSOL Multiphysics® v. 6.0 (Version 6.0), www.comsol.com. COMSOL AB, Stockholm, Sweden.

ИССЛЕДОВАНИЕ МОДИФИЦИРОВАННЫХ ТЕПЛОЗАЩИТНЫХ ПОКРЫТИЙ НА ОСНОВЕ ZrO_2

Закиров И.Ф.[1], Банных С.А.[1], Шак А.В.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: zif-89@mail.ru

STUDY OF MODIFIED HEAT-SHIELDING COATINGS BASED ON ZrO_2

Zakirov I.F.[1], Bannykh S.A.[1], Shak A.V.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The methods for modifying heat-shielding coatings by applying a layer based on ZrO_2 followed by drying and calcination at 1200°C in an inert atmosphere have been developed.

Для прорыва и достижения новых высот в авиационной, космической и других отраслях промышленности требуется постоянное решение нетривиальных задач. Один из способов повышения ресурса двигателя в авиации - применение различных жаростойких и коррозионностойких теплозащитных покрытий (ТЗП). Разработка, синтез, нанесение покрытий всегда была и остается наукоемкой технологией. Обычно пользуются ионно-плазменным, газоплазменным, шликерным и другими методами. Например, шликерный метод позволяет наносить покрытия на крупногабаритные детали и детали сложной формы. Также осуществлять локальный ремонт без удаления всего покрытия и повторного его нанесения по всей защищаемой поверхности, обеспечивая тем самым, высокую экономическую эффективность. Метод характеризуется относительной простотой и доступностью технологического оборудования, возможно широкое применение покрытий в различных отраслях индустрии для повышения жаростойкости разного рода материалов, включая неметаллические [1].

Применение ТЗП на основе ZrO_2 в лопатках авиационных газотурбинных двигателей, безусловно, является эффективным способом повышения КПД, технических характеристик, ресурса работы и температуры рабочего газа турбины. Тем не менее, опыт эксплуатации таких покрытий выявил ряд проблем, без решения которых дальнейшее развитие газотурбинной техники не возможен. Преобладающим методом нанесения покрытий в данной отрасли является газоплазменное напыление. ТЗП наносят на детали из жаропрочных сплавов на основе никеля, рабочая температура которых доходит до 1150°С. Их минус относительно высокая пористость и шероховатость, что приводит к повышенной газопроницаемости и окислению деталей [2,3].

Недостатки можно побороть дополнительной модификацией керамического слоя ТЗП различными методами или их комбинированием.

Ранее нами был разработан композиционный состав шликера на основе ZrO_2-7%Y_2O_3, армированного керамическим волокном [4]. После нанесения водного шликера требуется сушка на воздухе, далее прокаливание покрытия при температуре до 1200°С в течение 2 часов. Для предотвращения окисления материала лопатки, обжиг проводился в инертной атмосфере.

Отработка вариантов модификации ТЗП производилась на образцах из сплава ХН60ВТ размером 75х25х1,5 мм. Шероховатость поверхности начального керамического покрытия, нанесенного газоплазменным напылением, составляет от Ra 6 до Ra 9 в зависимости от условий напыления криволинейных поверхностей, а после нанесения шликера снижается до ~ Ra 4,5. Перспектива, как залечивание трещин, так и нанесение сплошного толстого слоя толщиной 50-80мкм.

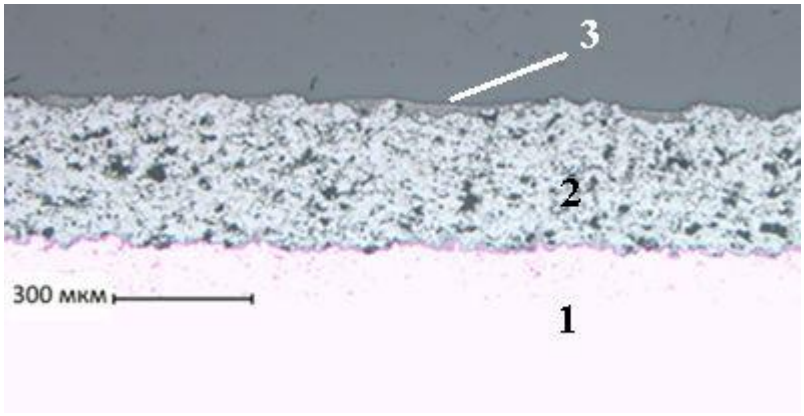


Рис. 1. Микроструктура модифицированного ТЗП на основе ZrO_2 после 25 термоциклов: 1- подслой, 2 - теплозащитный слой, 3 - слой намазки.

После испытаний покрытий в режиме термоциклирования: нагрев 20 → 1000°С → выдержка 10 минут → охлаждение в воде, визуальных дефектов не наблюдается, повышения шероховатости не происходит. Микроструктура ТЗП после 25 термоциклов представлена на рисунке 1.

1. Д.С. Кашин, П.Е. Дергачева, П.А. Стехов, Жаростойкие покрытия, наносимые шликерным методом (обзор), Труды ВИАМ №5 (65) 2018
2. Д.С. Кашин, П.А. Стехов, Современные теплозащитные покрытия, полученные методом электронно-лучевого напыления (обзор), Труды ВИАМ №2 (62) 2018
3. Н.И.Старцев, С.В.Фалалеев, Конструкция узлов авиационных двигателей: турбина и камера сгорания: электронный курс лекций, Государственный аэрокосмический университет (2007)
4. I. F. Zakirov, A. D. Nikulin, and N. V. Obabkov, Study of the properties of ceramic heat-protective coatings applied on metal substances, AIP Conference Proceedings 2015, 020118 (2018)

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТА ХИМИЧЕСКОЙ ДИФФУЗИИ И КОНСТАНТЫ ПОВЕРХНОСТНОГО ОБМЕНА КИСЛОРОДОМ $GdBaCo_{2-x}Fe_xO_{6-\delta}$

Закирьянов П.О.[1], Иванов И.Л.[1], Цветков Д.С.[1], Зуев А.Ю.[1], Середа В.В.[1], Малышкин Д.А.[1]

[1)] ФГАОУ ВО «УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», г. Екатеринбург, Россия

E-mail: petr.zakirianov@urfu.ru

DETERMINATION OF THE CHEMICAL DIFFUSION COEFFICIENT AND THE CONSTANT OF SURFACE OXYGEN EXCHANGE $GdBaCo_{2-x}Fe_xO_{6-\delta}$

Zakiryanov P.O.[1], Ivanov I.L.[1], Tsvetkov D.S.[1], Zuyev. A.Yu.[1], Sereda V.V.[1], Malyshkin D.A.[1]

[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia B. N. Yeltsin, Ekaterinburg, Russia

This work is devoted to the determination of diffusion coefficients and constants of surface oxygen exchange in double perovskites, barium and gadolinium cobaltites by ECR (electrical conductivity relaxation) method. The values of the total electrical conductivity were also determined.

В двойных перовскитах кобальтитах бария и гадолиния реализуется сверхструктура с упорядочением перовскитных групп, содержащих Ba и Gd, что обеспечивает неэквивалентность физико-химических свойств перовскитных слоев. Сообщается [1], что в данных соединениях кислородная нестехиометрия (при $0<\delta<1$) реализуется в основном за счет слоев [GdO]. Таким образом, образуются слои, насыщенные кислородными вакансиями, что обеспечивает высокие ион-транспортные свойства. Однако влияние допирования в подрешетку кобальта на транспортные свойства обсуждаемых соединений малоизучено.

В рамках данной работы был синтезирован ряд допированных железом кобальтитов бария и гадолиния $GdBaCo_{2-x}Fe_xO_{6-\delta}$ (x = 0; 0.2; 0.4; 0.6). Получены данные по электропроводности и определенны значения коэффициентов диффузии и константы поверхностного обмена кислородом методом ECR (electrical conductivity relaxation).

Полученные данные позволяют судить об влиянии допирования железом в подрешетку кобальта на транспортные свойства исследуемых соединений.

Работа была выполнена при поддержке Министерства Науки и Высшего Образования РФ, соглашение № 075-03-2021-051/5

1. Calculation of arrangement of oxygen ions and vacancies in double perovskite $GdBaCo_2O_{5+\delta}$ by first-principles DFT with Monte Carlo simulations / H. Shiiba [et al.] // Phys. Chem. Chem. Phys. – 2013. – Vol. 15. – № 25. – P. 10494-10499

ПРОТОННАЯ ПРОВОДИМОСТЬ В СОДОПИРОВАННЫХ ($Sr^{2+} \rightarrow La^{3+}$; $Ca^{2+} \rightarrow In^{3+}$) СЛОИСТЫХ ПЕРОВСКИТАХ НА ОСНОВЕ $BaLa_2In_2O_7$

Завиралова В.Д.[1], Абакумова Е.В.[1, 2], Бедарькова А.О.[1, 2], Тарасова Н.А.[1, 2], Анимица И.Е.[1, 2]

[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

[2)] Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: vika20040607@ya.ru

PROTON CONDUCTIVITY IN CO-DOPED ($Sr^{2+} \rightarrow La^{3+}$; $Ca^{2+} \rightarrow In^{3+}$) LAYERED PEROVSKITES BASED ON $BaLa_2In_2O_7$

Zaviralova V.D.[1], Abakumova E.V.[1, 2], Bedarkova A.O.[1, 2], Tarasova N.A.[1, 2], Animitsa I.E.[1, 2]

[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

[2)] Institute of High Temperature Electrochemistry, Yekaterinburg, Russia

It was shown that two-layer doped compositions based on $BaLa_2In_2O_7$ are perspective in the aspect of the achievement of proton transport in them. Physical and chemical qualities of compounds were investigated.

21 век ставит много сложных задач перед человечеством, включая защиту и улучшение качества окружающей среды и создание и развитие новых источников энергии. Эти две задачи тесно связаны со времен использования горючих ископаемых, приводящих к загрязнению окружающей среды, запас которых, к тому же, ограничен. Таким образом, проблема создания экологичного и эффективного источника энергии очень важна.

Электрохимические устройства, работающие на водороде, занимают значительное место в сфере водородной энергетики. Каждое из них очень нуждается в передовых керамических материалах с улучшенными свойствами, одно из которых – высокий уровень протонной проводимости. В общем случае электропроводность возрастает с увеличением концентрации переносчиков заряда и ростом их подвижности.

Традиционные высокотемпературные протонпроводящие материалы – это допированные цераты и цирконаты щелочноземельных металлов. Возможность воды проникать в их кристаллическую структуру обеспечена кислородными вакансиями, которые образованы в результате допирования. Концентрация протонов в их структуре напрямую зависит от концентрации кислородных вакансий и не превышает ~ 0.2 моль для акцепторно-допированных классических перовскитов.

Слоистые перовскиты $BaLa_nIn_nO_{3n+1}$ (n = 1, 2), которые могут быть названы структурой Раддлесдена-Поппера, состоят из перовскитных блоков, содержащих октаэдры [InO_6] и Ba/LaO (n = 1) или LaO (n = 2) слои. Экваториальные атомы кислорода связывают октаэдры [InO_6], и осевые атомы кислорода не связаны между собой. Это обеспечивает большую гибкость слоистых перовскитов по сравнению с классическими перовскитами. Допированные соединения, основанные на однослойной структуре $BaLaInO_4$, могут увеличивать концентрацию до 2 моль H_2O на формульную единицу, что на порядок выше, чем в акцепторно-допированных перовскитах. Ранее было показано, что допированные монослойные перовскиты на основе $BaLaInO_4$ являются перспективными протонными проводниками. Двуслойные перовскиты на основе $BaLa_2In_2O_7$ также являются перспективными в аспекте реализации в них протонного переноса [1]. В настоящей работе впервые была изучена возможность протонного переноса в содопированных слоистых перовскитах на основе $BaLa_2In_2O_7$. Получены новые слоистые перовскиты методом содипирования ($Sr^{2+} \rightarrow La^{3+}$; $Ca^{2+} \rightarrow In^{3+}$), изучены их физико-химические свойства.

1. Tarasova N. Layered Perovskites $BaLn_nIn_nO_{3n+1}$ (n = 1, 2) for Electrochemical Applications: A Mini Review // Membranes 2023, 13, 34. doi: 10.3390/membranes13010034

ПОЛУЧЕНИЕ ТОНКИХ КЕРАМИЧЕСКИХ ПЛЕНОК МЕТОДОМ АЭРОЗОЛЬНОГО НАПЫЛЕНИЯ

Завьялов М.А.[1, 2], Меркулов О.В.[2]
[1)] Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Уральский федеральный университет имени первого президента России Б.Н.Ельцина» г. Екатеринбург, Российская Федерация
[2)] Институт Химии Твердого Тела Уральского отделения Российской Академии Наук, г. Екатеринбург, Российская Федерация
E-mail: mazavyalov@gmail.com

PRODUCTION OF THIN CERAMIC FILMS BY AEROSOL DEPOSITION

Zavyalov M.A.[1, 2], Merkulov O.V.[2]
[1)] Federal State Autonomous Educational Institution of Higher Education «Ural Federal University named after the first President of Russia B.N.Yeltsin», Yekaterinburg, Russian Federation
[2)] The Institute of Solid State Chemistry of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russian Federation

The aerosol deposition method is designed for the formation of ceramic films for various purposes without the need for further sintering. The study examines the influence of various parameters on the quality of the film.

Тонкие пленки широко применяются в качестве функциональных, упрочняющих, светоотражающих, проводящих и диэлектрических материалов в различных сферах деятельности современного общества. Существенные результаты достигнуты в работах по использованию нового подхода формирования керамических пленок методом аэрозольного напыления – «Aerosol Deposition» (AD), основанного на ударной адгезии мелких частиц исходного порошка для формирования и микроструктурирования керамических слоев. Формирование плотного покрытия достигается при комнатной температуре, что позволяет получать электрокерамические элементы на основе легкоплавких материалов не требующих дальнейшего спекания готового продукта.

Принцип работы установки описывается несколькими основными этапами. Для генерации аэрозоля газ-носитель пропускается сквозь вибрирующий стакан, содержащий в себе порошок напыляемого материала, тем самым образуя псевдоожиженный слой. Поток воздуха увлекает частицы аэрозоля из стакана через сопло в камеру напыления с поддерживаемым внутри вакуумом. Поток ускоряется соплом образуя на выходе сфокусированную на образец струю аэрозоля. Частицы аэрозоля сталкиваются с подложкой на высокой скорости и

вследствие этого разбиваются на наноразмерные фрагменты, которые, в свою очередь, сцепляются и образуют керамическую плёнку [1].

Для проведения испытаний по реализации метода AD использовались следующие материалы: напыляемый порошок TiO_2 с различным размером частиц (400 нм; 5 мкм; 40 мкм) и подложка из $La_{0.5}Sr_{0.5}FeO_3$. Для определения качества получаемой пленки образец был исследован при помощи электронного сканирующего микроскопа JEOL JSM-6390LA.

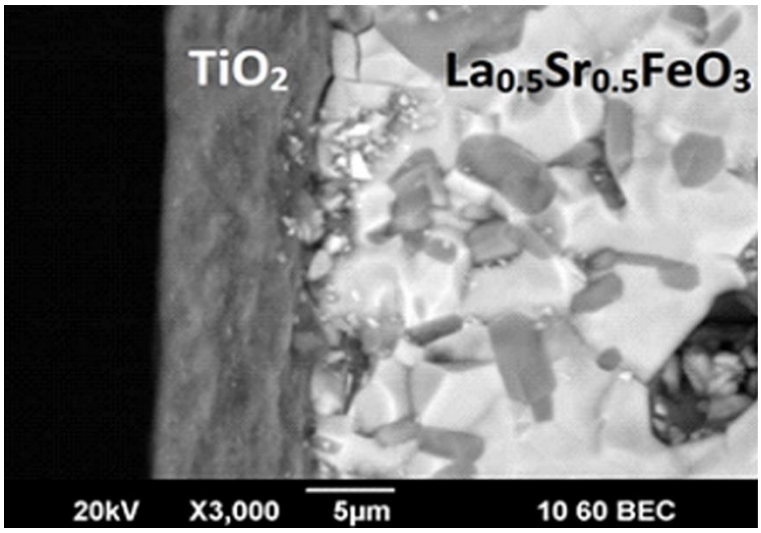


Рис. 1. SEM изображение поперечного сечение излома керамической пленки.

Анализу были подвергнуты некоторые основные параметры, предъявляемые к процессу AD. Одним из которых являлась зависимость давления в аэрозольной камере от расхода распыляющего газа. На основании полученных данных сделан вывод о линейном характере зависимости. Другой параметр, определяющий расстояние между выходящим отверстием сопла и опыляемой подложкой, который влияет на приобретаемую частицами кинетическую энергию, показал, что при расстоянии порядка 1 – 3 мм качество получаемой пленки является наиболее высоким и варьирование этого значения приводит к её ухудшению. Рассмотрена зависимость качества пленки от размеров частиц напыляемого материала. Анализ данной зависимости показал, что к наилучшему результату приводит эксперимент с использованием порошка с размером частиц 5 мкм, при 400 нм кинетической энергии не хватало для формирования пленки, а при 40 мкм частицы приобретали слишком большую энергию, что приводило к абразивной обработке поверхности подложки или плёнки. Наилучшие подобранные параметры позволили получить плотный слой пленки толщиной 5 – 7 мкм.

Рассмотренный метод аэрозольного напыления является перспективным для использования в керамических технологиях, таких как: получение твердооксидных топливных элементов, мембран со смешанной проводимостью и кислородных датчиков.

Работа выполнена в соответствии с государственным заданием Института химии твердого тела УрО РАН (тема № АААА-А19-119031890026-6).

1. Hanft D. et al. An Overview of the Aerosol Deposition Method: Process Fundamentals and New Trends in Materials Applications // Journal of Ceramic Science and Technology. 2015. Vol. 6, № 3. P.147–182

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КОМПАКТНЫХ И ВОЛОКНИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ НАНОСТРУКТУРНОГО МЕДЬ-НИОБИЕВОГО КОМПОЗИТА

Зайцев Е.Ю.[1], Спирин А.В.[1], Заяц С.В.[1], Кайгородов А.С.[1], Паранин С.Н.[1]
[1)] Институт электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: jzaizew@gmail.com

STUDY ON MECHANICAL PROPERTIES OF COMPACTED AND FIBROUS MATERIALS BASED ON NANOSTRUCTURED COPPER-NIOBIUM COMPOSITE

Zaytsev E.Yu.[1], Spirin A.V.[1], Zayats S.V.[1], Kaygorodov A.S.[1], Paranin S.N.[1]
[1)] Institute of Electrophysics UB RAS, Yekaterinburg, Russia

Mechanical properties of fibrous and powder materials based on nanostructured Cu-Nb alloy were studied as influenced by anneal temperature. At 800°C anneal, the UTS of powder materials (805–930 MPa depending on powder grade) is 1.5–1.7 times higher than of commercial wire, but with lower plasticity.

Композиты на основе Cu-Nb рассматриваются перспективными материалами для разработки систем многократной генерации сильных магнитных полей (СМП) благодаря сочетанию их высокой прочности и электропроводности. Материалы данного типа с наилучшими показателями прочности и электропроводности получают методами интенсивного пластического деформирования, например, волочением. При этом формируются наноструктурные волокна ниобия, распределенные в медной матрице [1]. Область применения материала, получаемого таким способом, в виде провода, – многовитковые соленоиды для генерации СМП субсекундной длительности [2]. Для создания же систем генерации “быстрых” СМП на основе массивных одновитковых индукторов провод оказывается непригодным. Поэтому основной задачей в своей работе мы ставили изготовление объемных образцов материалов из мелкодисперсного Cu-Nb композита порошковым способом и сравнение, в частности, их прочностных характеристик с образцами коммерческого провода прямоугольного сечения (шина 2x8 мм) [3] с близкими содержаниями фазы ниобия.

Для реализации подхода методом помола готовили порошки, используя в качестве исходного сырья микрокомпозиционный тонкий провод из Cu-18%Nb [3]. В процессе помола была выделена основная фракция порошка 20–64 мкм и небольшое количество фракции −20 мкм. Магнитно-импульсным прессованием [4] порошки компактировали в диски D 32 мм, отн. плотность достигала 97%. Отжиг компактов проводили в вакууме при температуре 500–850°C с выдержкой 1−3 ч. Условия получения и влияние температуры отжига компактных образцов

на фазовый состав, микроструктуру, электросопротивление и микротвердость изучены ранее в [5]. В настоящем докладе приведены данные по растяжению полученных материалов (предел прочности и отн. удлинение) в корреляции с микротвердостью. Растяжение тестовых пластинок с поперечным сечением 0,6–1 кв.мм и рабочей длиной 18–22 мм, подготовленных из спеченных порошковых образцов и шины, проводили при 20°C на компактной лабораторной установке с максимальным усилием до 1 кН при скорости отн. деформации 0,0016 1/с (точность измерений не хуже 0,5%).

На рисунке представлены зависимости предела прочности и микротвердости Hv материалов в зависимости от температуры отжига. С повышением температуры отжига от 500 до 850°C в результате релаксационных процессов твердость и предел прочности шины снижаются примерно вдвое, а порошковых образцов в 1,5 раза. При этом и твердость и прочность порошковых образцов после отжига при 800°C в 1,5 раза выше, чем у провода. Использование порошка более тонкого помола приводит к увеличению механических характеристик на 15%. Увеличение прочностных показателей с одновременным снижением относительного удлинения порошковых образцов при разрыве может говорить о влиянии на пластичность компонент композита вносимых примесей O, Fe, Cr, C и др., а также вторичных фаз на основе ниобия и меди, обнаруживаемых РФА [5]. Спекание порошковых материалов при 800–810°C в течение 1–1,5 ч можно считать приемлемым.

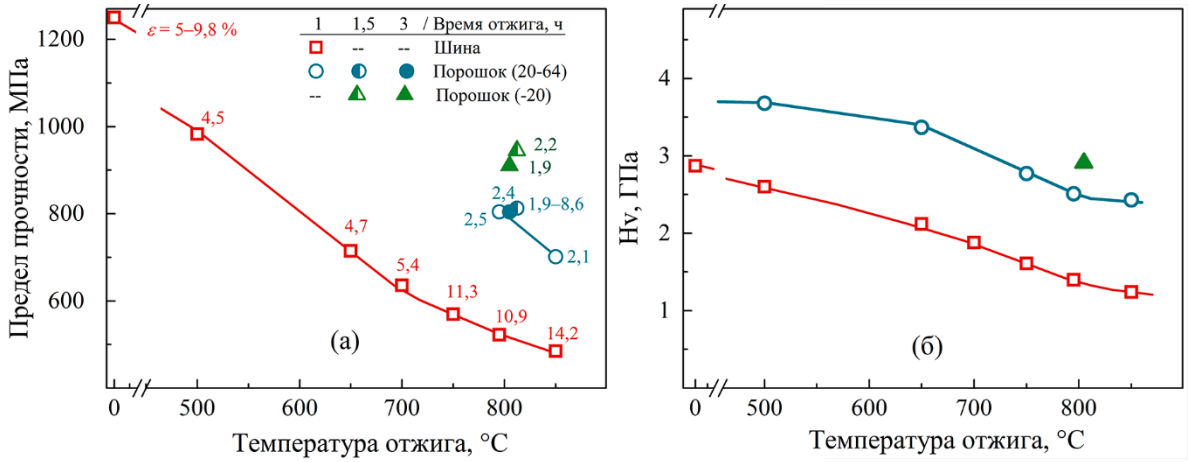


Рис. 1. Зависимость механических свойств материалов от температуры отжига: (а) – предел прочности (ε – относительное удлинение при максимальном усилии), (б) – микротвердость по Виккерсу (Nanotest 600, нагрузка 1 Н).

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ и Госкорпорации «Росатом» в рамках научного проекта № 20-21-00050.

1. Pantsyrny V., Shikov A., Vorobieva A. // IEEE Trans. on Appl. Supercond., 10(1), 1263 (2000).

2. Lagutin A., Rosseel K., Herlach F., Vanacken J., Bruynseraede Y. // Meas. Sci. Technol., 14, 2144 (2003).
3. ООО «Русатом МеталлТех» [Электронный ресурс]: офиц. сайт. компании. Москва, Россия. URL: http://rusmetaltech.ru (дата обращения: 27.02.2023).
4. Bokov A.A., Boltachev G.S., Volkov N.B. et. al. // Tech. Phys., 58, 1459 (2013)
5. Zaytsev E., Spirin A., Krutikov V., Paranin S., Zayats S., Kaigorodov A., Koleukh D., Kebets A., // Proc. of EFRE–2022, Tomsk, Russia, 375-381 (2022)

SPECTRAL RESPONSE IN LASER SYNTHESIZED $W_xMo_{(1-x)}S_2$ ALLOYS

Zharkova E.V.[1], Averchenko A.V.[1], Salimon I.A.[1], Abbas O.A.[1], Lagoudakis P.G.[1], Mailis S.[1]

[1)] Skolkovo Institute of Science and Technology, Moscow, Russian Federation
E-mail: ekaterina.zharkova@skoltech.ru

We report the spectral response of 2D $W_xMo_{1-x}S_2$ alloys based photoconductors fabricated by direct laser synthesis of single source precursors. A comparative study for the main figure of merits of these devices is presented.

The direct laser writing technique allows the localized synthesis of MoS_2 and WS_2 by laser-induced thermal decomposition of single-source precursor in ambient conditions [1]. Moreover, by mixing precursors it is possible to obtain a MoS_2/WS_2 alloy. By changing the volume ratio of single-source precursors in the mixture the stoichiometry can be controlled [2]. Alloys $W_xMo_{(1-x)}S_2$ with a ratio of components varying within the following range of values x={0; 0.25; 0.5; 0.75; 1} were obtained.

The photoelectrical characteristics of alloys were investigated in 2-terminal photoconductive devices (fig 1(a)).The photocurrent in these photodetectors was measured, as a function of illumination of $W_{0.75}Mo_{0.25}S_2$ alloy at the wavelength l=450nm. It was found to be linearly dependent on an applied voltage (fig 1(b)), indicating a photoconductive behaviour. The photocurrent measured in alloys and the corresponding responsivity ($R = I_ph/P$) for compositions within the whole range demonstrated sublinear behavior, with illuminating power (fig 1(c)). The dependence of responsivity on the composition was obtained at the power of incident radiation of 0.03mW (fig 1(d)). The spectral response of the photocurrent of theses photodetectors have been investigated, for different compositions, using a supercontinuum light source generating pulse trains at wavelengths within the range from 450nm to 1500nm.

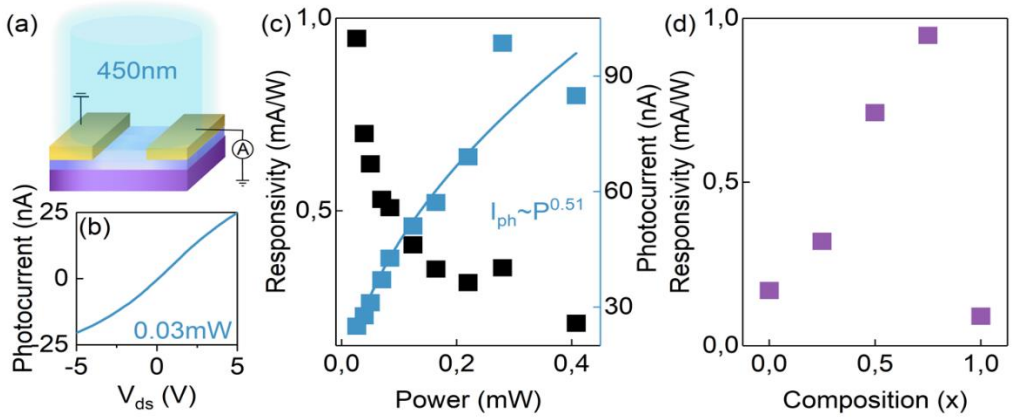


Fig. 1 (a) Sketch of the device and the measurement setup; (b) Photocurrent of $W_{0.75}Mo_{0.25}S_2$ under the 450nm laser beam illumination with the incident power 0.03mW; (c) Dependence of the photocurrent of $W_{0.75}Mo_{0.25}S_2$ on the varied incident power; (d) Composition dependence of the photoresponsivity

1. Abbas, O.A., Zeimpekis, I., Wang, H. et al. Solution-Based Synthesis of Few-Layer WS2 Large Area Continuous Films for Electronic Applications. Sci Rep 10, 1696 (2020)
2. Averchenko, A.V., Salimon, I.A., Zharkova, E.V., et.al. Laser-enabled localized synthesis of $Mo_{1-x}W_xS_2$ alloys with tunable composition, Materials Today Advances 17, 100351 (2023)

ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ ОБЖИГА ДИОКСИДА ЦИРКОНИЯ НА СВОЙСТВА КЕРАМИКИ

Жиренкина Н.В.[1], Косых А.С.[1], Буйначев С.В.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: nina_zhirenkina@mail.ru

INFLUENCE OF THE CALCINATION TEMPERATURE OF ZIRCONIUM DIOXIDE ON THE PROPERTIES OF CERAMICS

Zhirenkina N.V.[1], Kosykh A.S.[1], Buinachev S.V.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Samples of zirconium oxide were synthesized and ceramics were made on their basic. It has been studied that a decrease in the calcination temperature of zirconium dioxide leads to an increase in the density, strength and hardness of ceramics.

Широкое применение керамических материалов на основе диоксида циркония во многих сферах техники, промышленности и медицины обусловлено уникальным сочетанием свойств [1]. Стабилизированный диоксид циркония используют для изготовления подшипников, сопел, режущих инструментов ввиду высоких показателей ударной вязкости и прочности [2]. Керамика из диоксида циркония подходит для создания резьбонаправляющих устройств, рабочих колес насосов, уплотнений, кулачков, кислородных датчиков и нагревательных элементов благодаря выдающимся механическим характеристикам [3]. Изготовление керамики при пониженной температуре спекания позволяет снизить энергозатраты и требования к печам на производстве. Формирование высокоплотной керамики простым методом холодного прессования за счет получения уникальных свойств порошков диоксида циркония является непростой задачей.

Перед осаждением в раствор оксонитрата циркония добавили серную кислоту в соотношении Zr/SO_4=1/0,5. Гидроксид циркония получали контролируемым осаждением раствора оксонитрата циркония аммиаком при заданном значении pH=8. Далее полученные гидроксиды подвергали промывке, гидротермальной обработке, фильтрации, сушке. С целью изучения влияния температуры термообработки порошков диоксида циркония на механические свойства керамики проводили обжиг при температуре 800, 900, 1000, 1100 °C. Далее порошки диоксида циркония подвергали помолу в бисерной мельнице с добавкой 5 мас. % Y_2O_3 и 0,25 мас. % Al_2O_3, после чего проводили распылительную сушку. Полученные порошки формовали методом холодного одноосного прессования и спекали при температуре 1350 °C.

Порошки ZrO_2 обжигали при температурах от 800 до 1100 °С, повышение температуры привело к уменьшению удельной поверхности порошков от 58 до 5 $м^2$/г. Количество сульфат-ионов при этом снизилось с 2,38 до 0,42 мас. %, а также возросло значение pH точки нулевого заряда ($pH_{ТНЗ}$) от 2,3 до 6,7. Ввиду высокой удельной поверхности и пористости порошков, обожженных при 800 °С, керамическая заготовка в ходе прессования не формовалась. Обжиг ZrO_2 выше 900 °С приводил к существенному снижению доли тетрагонального диоксида циркония в керамике, что сопровождалось резким понижением прочности. Низкая прочность при температурах обжига 1000-1000 °С обусловлена высоким содержание доли моноклинной фазы ZrO_2 в керамике после спекания. Вероятно, низкая степень стабилизации при высоких температурах обжига связана с высоким значением pH шликера на стадии помола ввиду небольшого содержания сульфат-ионов в порошках. Высокое значение pH шликера снижает степень растворения оксида иттрия и приводит к его неравномерному распределению в керамике. Вследствие чего, нестабилизированный ZrO_2 при охлаждении керамики претерпевает тетрагонально-моноклинное превращение, сопровождающееся увеличением объема элементарной кристаллической ячейки. Изменение объема порождает микротрещины в керамическом образце и приводит к снижению механической прочности.

Данная работа выполнена при поддержке совета по грантам Президента Российской Федерации СП-2022

1. A.V. Maletsky “Structure formation and properties of corundum ceramics based on metastable aluminium oxide doped with stabilized zirconium dioxide”, Ceramics International (2021)
2. S.A. Sonal, B.K. Mishra “Comprehensive review on the synthesis and performance of different zirconium-based adsorbents for the removal of various water contaminants”, Chemical Engineering Journal (2021)
3. Zh. Xiuping, W. Xin, Sh. Jing “Additive manufacturing of zirconia ceramics: a state-of-the-art review”, Journal of Materials Research and Technology (2020)

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СЛОЖНОГО ОКСИДА $Pr_{1.6}Ca_{0.4}Ni_{1-y}Cu_yO_4$ В КАЧЕСТВЕ КАТОДНОГО МАТЕРИАЛА ДЛЯ СРЕДНЕТЕМПЕРАТУРНЫХ ТОТЭ

Жуланова Т.Ю.[1, 2], Иванова А.С.[2], Цвинкинберг В.А.[1, 2], Русских О.В.[2], Филонова Е.А.[2], Пикалова Е.Ю.[1, 2]

[1)] Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН

[2)] Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: vfrcbvxernfyz@mail.ru

PHYSICO-CHEMICAL PROPERTIES OF A COMPLEX OXIDE $Pr_{1.6}Ca_{0.4}Ni_{1-y}Cu_yO_4$ AS A CATHODE MATERIAL FOR MEDIUM-TEMPERATURE SOFC

Zhulanova T.Yu.[1, 2], Ivanova A.S.[2], Tsvinkinberg V.A.[1, 2], Russkikh O.V.[2], Filonova E.A.[2], Pikalova E.Yu.[1, 2]

[1)] Institute of High-Temperature Electrochemistry of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences

[2)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

In this paper, a correlation was carried out between the conditions of various synthesis methods, the crystal structure and the physicochemical properties of complex oxides with the Raddlesden-Popper structure $Pr_{1.6}Ca_{0.4}Ni_{1-y}Cu_yO_4$.

Поиск подходящих электродных материалов для твердооксидных топливных элементов представляется перспективным направлением в исследовательских работах. Сложнооксидные фазы со структурой Раддлесдена-Поппера в силу своих функциональных параметров могут рассматриваться в качестве перспективных катодных материалов для ТОТЭ [1]. Следовательно, становятся актуальными изучения свойств частично замещенных на переходные металлы в Ni-позиции оксидов $Pr_{1.6}Ca_{0.4}NiO_4$.

Синтез сложных оксидов общего состава $Pr_{1.6}Ca_{0.4}Ni_{1-y}Cu_yO_4$ (y = 0.0-0.4) (PCNCO) осуществляли способом горения нитрат-органических прекурсоров при варьировании органического компонента (глицин, глицерин, лимонная кислота и поливиниловый спирт), используемого для их приготовления. Фазовый состав и кристаллическую структуру порошковых материалов исследовали методом рентгеновской дифракции с использованием дифрактометра DRON-6 в Cu-Kα-излучении. Уточнение кристаллоструктурных параметров проводили методом Ритвелда с использованием программного пакета Fullprof Suite.

Для изучения термического расширения получали компакты исследуемых порошков при давлении 4 тонны на 1 см^2 с помощью гидравлического пресса (PLG20, Россия). Полученные прессовки спекали в муфельной печи в диапазоне температур 1350-1450°C в течение 5 часов при скорости нагрева и охлаждения

100 °C/час. Дилатометрические измерения серии PCNCO (y = 0.0-0.4) проводились на измерителе Tesatronic TT-80 (TESA, Швейцария). Измерения проводились в диапазоне температур 100-900°C со скоростью нагрева/охлаждения 2°C/мин. Изобарический линейный коэффициент термического расширения образцов рассчитывали из наклона экспериментальных зависимостей, полученных по данным дилатометрии.

Для измерения проводимости образцов, спрессованные образцы полировали на алмазном диске и очищали ультразвуком в присутствии этилового спирта. Затем на образец устанавливали четыре платиновых зонда толщиной 0.1 мм и смазывали платиновой пастой. Зонды припекали при температуре 1000°C в течение 1 часа. Электропроводность измеряли четырех-зондовым методом на постоянном токе при температуре от 200 до 900°C. Данные во время эксперимента были записаны с помощью автоматической измерительной системы Zirconia M.

На анализаторе дисперсности SALD-7101 Shimadzu методом лазерного светорассеяния выполнено определение распределения частиц по размерам в PCNCO (y = 0.0-0.4). Величины удельной поверхности никелатов празеодима, кальция с различным содержанием меди оценивали методом термической десорбции азота на автоматическом анализаторе поверхности и пористости SoftSorbi-II ver.1.0.

По результатам полученных измерений установлено, что материалы PCNCO (y = 0.0-0.4) являются приемлемыми для дальнейшего использования в качестве катодного материала для среднетемпературных твердооксидных топливных элементов.

1. Pikalova E. Yu., Kolchugin A. A., Sadykov V. A., Sadovskaya E. M., Filonova E. A., Eremeev N. F., Bogdanovich N. M. Structure, transport properties and electrochemical behavior of the layered lanthanide nickelates doped with calcium // Int. J. Hydrogen Energy. – 2018. – V. 43. – P. 17373-17386.

СЕКЦИЯ 6

ИНФОРМАЦИОННЫЕ СИСТЕМЫ И ТЕХНОЛОГИИ

РАЗРАБОТКА ВЕБ-ПРИЛОЖЕНИЯ ДЛЯ СЕГМЕНТАЦИИ СОДЕРЖИМОГО HTML-СТРАНИЦ МЕТОДАМИ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Алексеева А.А.[1]
[1)] Институт Вычислительной Математики и Информационных Технологий, Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, Казань, Россия
E-mail: alexandrin-a@yandex.ru

DEVELOPMENT OF A WEB APPLICATION FOR SEGMENTATION OF HTML PAGE CONTENT USING MACHINE LEARNING METHODS

Alexeeva A.A.[1]
[1)] Institute of Computational Mathematics and Information Technologies, Kazan (Volga Region) Federal University, Kazan, Russia

This paper highlights the analysis of the main approaches to solving the problem of segmentation of an HTML page, and also provides a description of the algorithm for segmenting an HTML page based on semantic and structural analysis.

Часто люди, которые пишут научные работы, а также те, кто просто ищет информацию в интернете для себя, тратят большое количество времени на удаление лишней информации из скопированного текста. Проблема состоит в том, что на HTML-страницах большое количество рекламы и лишней информации, такой как комментарии, ссылки на другие страницы и т.д. Такая проблема может возникнуть не только при ручном изъятии текста, при автоматической обработке веб-страниц зачастую не лучшем решение является извлечение всей информации со страницы.

После анализа существующих статей по теме сегментации содержимого HTML-страниц были выделены три основных направления решения этой задачи: на основе разработанных правил, на основе анализа структуры элементов HTML-страницы, на основе семантического анализа HTML-страницы.

В решении задачи сегментации содержимого HTML-страниц важную роль играют и структура элементов HTML-страницы, и их содержимое. В связи с чем более перспективными являются решения, использующие оба подхода. Также задачу сегментации содержимого HTML-страниц можно свести к задаче классификации методами машинного обучения, как, например, описано в статье [1]. Авторы этой статьи с помощью структурного анализа DOM-дерева и семантического анализа выделяют набор признаков для каждого элемента HTML-страницы, и на основе полученного набора признаков для каждого элемента выноситься вердикт о принадлежности к классу «основной информации».

Цель данной работы заключается в том, чтобы разработать приложение, позволяющее выделить основную текстовую информацию из HTML-страниц. Для этого вся информация с HTML-страниц делится на три класса: «удаляемая информация», «основная информация» и «игнорируемая информация». Для решения задачи сегментации были реализованы два подхода: на основе структурного анализа DOM-дерева HTML-страницы и на основе одновременно и структурного, и семантического анализа. Оба алгоритма последовательно относят каждый элемент HTML-страницы к одному из трех классов. Для сравнения точности работы алгоритмов подсчитывались две оценки: среднее значение метрики accuracy разметки всех элементов HTML-страницы на три группы («удаляемая информация», «основная информация» и «игнорируемая информация») для 50 HTML-страниц из размеченного вручную набора данных и среднее значение метрики accuracy разметки всех элементов HTML-страницы на две группы («основная информация» и «не основная информация») для 100 HTML-страницах из преобразованного набора данных конкурса CleanEval. Алгоритм на основе одновременно и структурного, и семантического анализа показал улучшение обоих оценок более, чем на 10 %, по сравнению с алгоритмом на основе только структурного анализа.

1. Thijs Vogels, Octavian-Eugen Ganea, and Carsten Eickhoff. 2018. Web2text: Deep structured boilerplate removal. In European Conference on Information Retrieval, pages 167–179. Springer.

РАЗРАБОТКА ПОДХОДА ДЛЯ ПРАКТИЧЕСКОЙ РЕАЛИЗАЦИИ АВТОНОМНОЙ ОХРАНЫ ПРОИЗВОЛЬНОГО КОМПЛЕКСА ПОМЕЩЕНИЙ ПРИ ПОМОЩИ PEDD

Андрусик М. С.[1], Кашин И. В.[1]
[1)] УрФУ
E-mail: Matvey.Anderusik@urfu.me

DEVELOPMENT OF AN APPROACH FOR PRACTICAL IMPLEMENTATION OF AUTONOMOUS SECURITY OF AN ARBITRARY COMPLEX OF PREMISES USING PEDD

Andrusik M. S.[1], Kashin I. V.[1]
[1)] UrFU

This report proposes an organizing method for autonomous ground guarding of a premises complex with a given guard objects priority. The method is based on an algorithm that reproduces an arbitrary predetermined equilibrium distribution.

В течение последних десятилетий наблюдается тенденция к цифровизации различных сфер жизни. В настоящее время активно развиваются возможности автоматизации многих процессов, которые требуют наличия некоего оператора (человека).

В частности, можно рассмотреть процесс организации охраны некоторого комплекса помещений. Действительно, такая задача сегодня требует оператора, поскольку, во-первых, традиционное её решение – наземная охрана, осуществляются людьми (охранниками); во-вторых, более современное её решение – использование стационарных камер видеонаблюдения, также не обходится без человека, который должен отслеживать данные с камер. В последнем случае человек может быть заменён «умными» алгоритмами машинного обучения, способными следить за происходящим на экране мониторов. Однако такое решение имеет ряд недостатков: дороговизна видеооборудования, уязвимость и незащищенность камер, статичность положения камер, которая не позволяет произвести полный визуальный охват помещений и т.д.

Мы предлагаем альтернативное решение задачи организации автономной охраны комплекса помещений. Суть его состоит в том, чтобы организовать наземное динамическое слежение за охраняемым объектом на уровне координации поведения группы дронов. В таком случае задача делится на ряд подзадач: целостный охват помещений дронами, непрогнозируемость траекторий движения дронов, реакция со стороны дронов на угрозу и возможность задавать карту приоритетов охраняемых внутренних объектов. Под картой приоритетов подразумевается то, что какие-то внутренние охранные

объекты будут более приоритетными по отношению к другим. То есть, располагая определённым числом дронов, способных свободно перемещаться по комплексу помещений и в случае обнаружения нарушителя нейтрализовать его, мы можем предложить такой способ организации движения этих дронов, который позволит решать вышеперечисленные подзадачи.

В рамках данной работы было разработано программное обеспечение, реализующее численный метод PEDD (1), воспроизводящий произвольное наперёд заданное равновесное распределение. В качестве восстанавливаемого распределения использовался склад, представляющий собой систему комнат и переходов между ними, каждые из которых заполнены своими локальными распределениями – картами приоритетов. Распределение воспроизводилось движением по складу дронов-агентов, траектории которых определялись методом. В процессе симуляции агенты способны реагировать на единичные мультиугрозы, на уровне метода представляющие собой локализованные возмущения в исходном распределении.

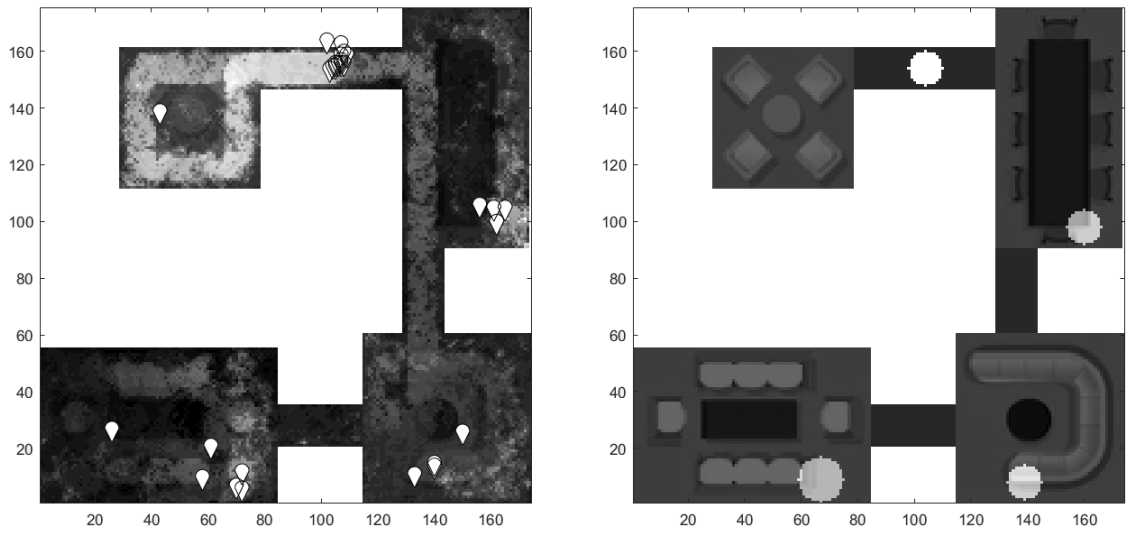


Рис. 1. фрейм работы программы в произвольный момент времени

На рисунке представлены карта состояния покрытия помещения роботами-охранниками (слева) и карта приоритетов внутренних охраняемых объектов (справа) в определенный момент работы алгоритма. Позиции роботов-дронов обозначены небольшими белыми метками. Позиции объектов-нарушителей, проникших в помещение, обозначены светлыми кружками различного радиуса .

1. Kashin I. V. Predetermined equilibrium driven dynamics // AIP Conference Proceedings. – 2020. 2313, 030048.

РАЗРАБОТКА ПРОТОТИПА МОДЕЛИ КРОВОТОКА В ПЕЧЕНИ

Аскарова Е.Ф.[1, 2], Соловьева С.Н.[1, 2]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
[2)] ООО Научно-исследовательский центр «Авантренд», г. Екатеринбург, Россия
E-mail: liza_askarova@mail.ru

DEVELOPMENT OF A PROTOTYPE MODEL OF BLOOD FLOW IN THE LIVER

Askarova E.F.[1, 2], Soloveva S.N.[1, 2]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia
[2)] LLC Research Center «Avantrend», Yekaterinburg, Russia

This paper discusses the prerequisites for the creation, as well as the main stages for the development of a prototype model of normal liver blood flow.

В настоящее время заболеваемость патологиями печени составляет 2,6 млн человек в год [1]. Одним из основных патогенетических механизмов повреждения печени является нарушение циркуляции крови в портальной системе. Например, при циррозе печени скорость течения снижается, повышается давление в основных сосудах и начинает преобладать коллатеральный кровоток – течение крови по дополнительным сосудам – шунтам. Изменение гемодинамики в сосудах печени приводит к нарушению её функционирования. Соответственно, нарушение кровообращения печени может привести к фатальным последствиям, вплоть до летального исхода.

На сегодняшний день отсутствуют общепринятые методики обследования, критерии оценки и интерпретации отклонений кровотока печени. Таким образом, для установления изменений в портальной системе кровообращения, возникает необходимо знать её нормальное состояние – состояние без патологий.

Одним из способов решения проблемы является создание модели кровотока в норме. Модель кровообращения является сводной моделью, включая анатомическую модель печени и физическую гемодинамическую модель. Геометрия сосудов печени строится по КТ-исследованиям брюшной области. На основе снимков сегментируются сосуды печени, строится ориентированный граф, каждому ребру которого соответствует сосуд, а ориентации ребра – направления течения крови по нему. При помощи геометрической модели можно установить параметры, необходимые для дальнейшего физического моделирования.

Для физического моделирования многие исследователи используют двумерные гемодинамические модели с приближением стационарного ламинарного течения. Однако гидродинамическая картина в трехмерном случае

значительно отличается от картины, которую можно наблюдать в плоских конфигурациях или конфигурациях осевой симметрии. Также, приближение ламинарного течения в бифуркациях сосудов – неверно. Соответственно, одной из задач для создания идеальной модели является выбор наиболее удобной физической модели и её модернизация, с учетом выбранных граничных условий.

Целью работы является разработка прототипа модели кровотока печени в норме. В результате применения модели должна быть построена точная анатомическая модель печени и её сосудов, показано направление течения крови и рассчитано количество кровотока, проходящего через определенный участок.

Задачи исследования:

1. Изучение существующих анатомических и физических моделей, оценка возможности их применения к данной задаче.
2. Изучение инструментов для реализации, подбор подходящих.
3. Создание модели кровотока печени в норме.

В рамках исследования были получены следующие результаты: проведен литературно-аналитический обзор, в результате которого был выбран компилятивный прототип, состоящий из анатомической [2] и физической моделей [3]; проведена критика компилятивного прототипа и предложены пути доработки сводной модели; на основании критики был разработан прототип модели кровотока в печени, для которого будет проводиться апробация.

1. Abstracts of The International Liver Congress 2022. 22–26 June 2022, London, United Kingdom. Journal of Hepatology 2022. vol. 77(S1). 1105pp.
2. Носова С.А. Построение модели кровеносных сосудов и их исследование по данным компьютерной томограммы. Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. 2014. №. 1(2). С. 265-270.
3. Amare R., Hodneland E., Roberts J.A., Bahadori A.A., Eckels S. Modeling a 3-D multiscale blood-flow and heat-transfer framework for realistic vascular systems. Sci Rep. 2022. vol. 12(1):14610. doi: 10.1038/s41598-022-18831-3.

О ВЗАИМОДЕЙСТВИИ ИНФОРМАЦИОННЫХ ПРОДУКТОВ ТЕНДЕРНОГО СПЕЦИАЛИСТА И ЕГО РУКОВОДИТЕЛЯ

Банников И. К.[1], Гольдштейн С. Л.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: ilya.bannikov@urfu.ru

ON THE INTERACTION OF INFORMATION PRODUCTS OF THE TENDER SPECIALIST AND HIS SUPERVISOR

Bannikov I. K.[1], Goldstein S. L.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The article describes a model of interaction between the participants of the dialogue between the tender specialists and its head

Для эффективного взаимодействия тендерных специалистов, как базового звена процесса подготовки и проведения торгов, полезна динамическая модель, аналогичная модели "начальник-подчиненный"[1]. Эта модель позволяет учитывать различные факторы, влияющие на качество и эффективность процесса. Необходимо разработать модели программного решения, которое позволяет автоматизировать процесс подготовки торговых предложений.

Мы рассматриваем двух участников процесса: тендерного специалиста и его руководителя.

Динамика тендерных процессов определяется следующим образом:

$dx/dt = a_1 * xy - a_2 * x + b_1 * yz - b_2 * xz$

$dy/dt = a_3 * xy - a_4 * y + b_3 * zx - b_4 * yx$,

где:

t - время

x(t) - динамика тендерного специалиста

y(t) - динамика руководителя

z(t) - динамика предложения

$a_1 * xy$ - показывает, сколько предложений и какого качества должен подготовить тендерный

специалист;

$a_2 * x$ - учитывает устаревание предложения;

$b_1 * yz$ - описывает взаимокоррекцию между руководителем и тендерным специалистом;

$b_2 * xz$ - учитывает затраты на анализ предложения тендерного специалиста руководителем;

$a_3 * xy$ - описывает взаимодействие тендерного специалиста и руководителя в процессе

подготовки предложения;

a_4 * y - учитывает устаревание требований заказчика;

b_3 * zx - описывает взаимокоррекцию между тендерным специалистом и предложением;

b_4 * yx - учитывает затраты на анализ предложения руководителем.

С помощью этой модели мы можем определить, как изменяется динамика процесса в зависимости от различных факторов, таких как изменение требований заказчика, затраты на анализ и подготовку предложения, взаимодействие между тендерным специалистом и руководителем и т.д.

Данная модель может быть использована для формирования фазовых портретов и в дальнейшем может служить предпосылкой для перехода к модели многоуровневого управления[2], тогда обе модели дают полное представление о задаче. Также на основе модели разработан модуль программного решения, которое позволяет автоматизировать процесс подготовки торговых предложений.

1. Милованов В.П. Неравновесные социально-экономические системы: синергетика и самоорганизация / В. П. Милованов – М.: Эдиториал УРСС, 2001. – 264 с.
2. Печеркин С.С. Устойчивость, стимулируемость и распределенность многоуровневого управления: постановка задачи / С. С. Печеркин, С. Л. Гольдштейн, С. В. Кабанова, А. И. Короткий // Материалы III международного НПС «Интеллектуальные информационные технологии в управленческой деятельности». – Екатеринбург: ИПК УГТУ-УПИ, 2001. – С.244–253.

СТОХАСТИЧЕСКАЯ ДИНАМИКА В СИСТЕМЕ ДВУХ ПЕРИОДИЧЕСКИХ ПОПУЛЯЦИЙ, СВЯЗАННЫХ ВЗАИМНОЙ МИГРАЦИЕЙ

Беляев А.В.[1], Ряшко Л.Б.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: belyaev.alexander1337@yandex.ru

STOCHASTIC DYNAMICS IN A SYSTEM OF TWO PERIODIC POPULATIONS COUPLED BY MUTUAL MIGRATION

Belyaev A.V.[1], Ryashko L.B.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

In this paper, we consider a metapopulation system consisting of two coupled subsystems modeled by the discrete Ricker map. The purpose of this study is to analyze the modes of corporate dynamics of two periodic subsystems, as well as noise-induced transitions.

В наши дни учеными в области нелинейной динамики большое внимание уделяется на исследование связанных систем. Несмотря на простое устройство динамических систем, связав их, можно продемонстрировать множество режимов, имеющих качественное различие. Особое внимание в области математического моделирования, связанного с экологией, требует изучение динамики популяционных систем, у которых существует связь через взаимную миграцию.

В текущей работе рассматривается метапопуляционная система, состоящая из двух связанных подсистем. Данные подсистемы моделируются дискретным отображением Рикера. При отсутствии взаимной миграции между системами наблюдаются различные динамические режимы. Подробный анализ и исследование стохастических эффектов в случае одной регулярной, а второй хаотической подсистем был проведен в статье [1]. Целью же данной работы является анализ динамических режимов корпоративной динамики при изменении интенсивности взаимной миграции между популяционными подсистемами, демонстрирующими в условиях изоляции периодические режимы. Представлены результаты бифуркационного анализа данной системы, включающий рассмотрение показателя Ляпунова, который определяет хаотичность динамической системы. Также исследовано разнообразие аттракторов системы и проведен анализ колебательных режимов данных популяционных подсистем. Для дальнейшей демонстрации стохастических феноменов построены и изучены бассейны притяжения сосуществующих аттракторов при варьировании коэффициента связи. В дополнение к исследованию детерминированной системы в работе рассматривается

стохастическая система, которая учитывает влияние случайных возмущений. Представлены примеры воздействия шума на аттракторы данной метапопуляционной системы. Используя метод функции стохастической чувствительности и метод доверительных областей, исследованы индуцированные шумом переходы между аттракторами, порождающие новые режимы поведения популяционных подсистем. Изображена зависимость показателя Ляпунова от интенсивности случайного шума, а также показано распределение точек данной системы в зависимости от величины случайного воздействия.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №21-11-00062).

1. A. Belyaev, I. Bashkirtseva, L. Ryashko, Int. J. of Bif. and Ch., 32: 14, 2250220 (2022).

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ОЦЕНКИ ИОННОГО СОСТАВА ПРОМЫШЛЕННОЙ МОЛОЧНОЙ ПРОДУКЦИИ

Чередникова А.А.[1, 2], Мазинг М.С.[2], Романова В.В.[2], Зайцева А.Ю.[2]
[1)] Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, г. Санкт-Петербург, Российская Федерация
[2)] Институт аналитического приборостроения РАН, г. Санкт-Петербург, Российская Федерация
E-mail: arina_ch@list.ru

APPLICATION OF MACHINE LEARNING METHODS TO ASSESS THE IONIC COMPOSITION OF INDUSTRIAL DAIRY PRODUCTS

Cherednikova A.A.[1, 2], Mazing M.S.[2], Romanova V.V.[2], Zaitceva A.Yu.[2]
[1)] Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia
[2)] 2Institute of Analytical Instrumentation, Russian Academy of Sciences, St. Petersburg, Russia

The paper considers the possibility of improving FoodTech-market technologies by developing and implementing methods of intelligent analysis of dairy products.

Цифровизация и совершенствование технологий производства промышленной молочной продукции требуют внедрения новых интеллектуальных методов для оценки качества, контроля физико-химических показателей продуктов питания. [1,2]

Для проведения исследования было выбрано 10 образцов молочной продукции промышленного производства: 5 пастеризованных и 5 ультрапастеризованных. Для определения состава микронутриентов был использован метод прямой потенциометрии – измерения ЭДС электрохимической мультисенсорной системы. Измерительный блок состоит из электрода сравнения и 9 измерительных электродов, чувствительных к ионам H^+, Na^+, K^+, $NO3^-$, Cl^-, F^-, Ca^{2+}, NH^{4+}, Mg^{2+}. [3]

Обработка полученного многомерного массива данных методом главных компонент и подтверждение результатов иерархическим методом кластеризации – методом полной связи – выявили четкую категоризацию по виду термической обработки молочной продукции: группы пастеризованных и ультрапастеризованных образцов промышленной молочной продукции.

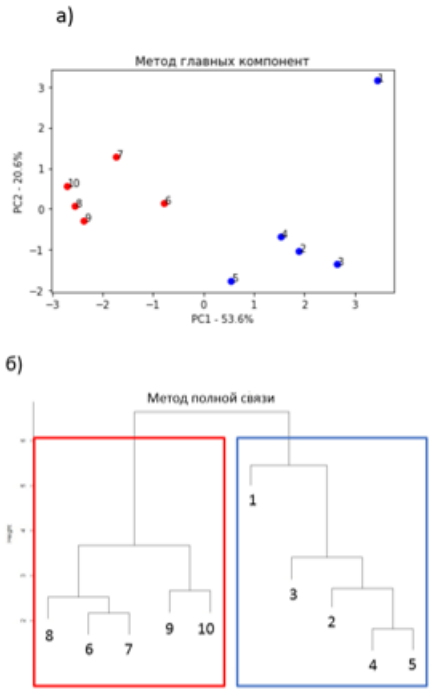


Рис. 1. Представлены две группы образцов молочной продукции промышленного производства: 1-5 – ультрапастеризованное, 6-10 – пастеризованное. а) распределение образцов, представленное в виде проекций на оси главных компонент; б) результат кластеризации образцов методом полной связи.

Результаты, достигнутые в ходе исследования, демонстрируют перспективность разрабатываемой методики и возможность ее дальнейшего внедрения в процесс производства молочной продукции.

1. Жакова К.И., Миронова Н.П. Современные тенденции развития технологий пищевых производств. Пищевая промышленность: наука и технологии. 2022;15(3):6-12. https://doi.org/10.47612/2073-4794-2022-15-3(57)-6-12
2. Юрова, Е. А. Применение инструментальных методов анализа для контроля молока и молочных продуктов / Е. А. Юрова, А. И. Бурыкин, Е. А. Бурыкина // Молочная промышленность. – 2015. – № 4. – С. 13-15. – EDN TPNLAL.
3. Гузенко, М. М. Интеллектуальная сенсорная система ранжирования ионного состава грудного молока / М. М. Гузенко, А. Ю. Зайцева // Научное приборостроение. – 2022. – Т. 32, № 4. – С. 58-67. – DOI 10.18358/np-32-4-i5867. – EDN ERBSUB.

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ПОСТОЯННОЙ СВЕРХТОНКОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ СПЕКТРОВ ЭПР РН-ЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ НИТРОКСИЛЬНЫХ РАДИКАЛОВ АЛГОРИТМАМИ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Давыдов Д. Р.[1], Антонов Д.О.[1], Ковалева Е.Г.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: danil.davydov@urfu.me

PREDICTION OF THE SUPERFINE INTERACTION CONSTANT OF PH-SENSITIVE NITROXIDE RADICAL EPR SPECTRA BY MACHINE LEARNING ALGORITHMS

Davydov D.R.[1], Antonov D.O.[1], Kovaleva E.G.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

In this study, a neural network architecture (multilayer perceptron) was developed to predict the parameter of the superfine interaction constant of complex dynamic EPR spectra of pH-sensitive nitroxide radicals obtained from the analysis of solid-phase nanostructured systems.

pH-чувствительные нитроксильные радикалы, применяемые в качестве спинового зонда [1] или метки [2], все чаще находят применение для исследования кислотно-основных равновесий внутри пор и вблизи гидратированной поверхности материалов, электрического потенциала поверхности [3,4], а также для неинвазивного трехмерного внеклеточного pH-картирования [5]. Использование pH-чувствительных нитроксильных радикалов для определения ранее озвученных характеристик анализируемых веществ связано с получаемыми спектрами электронного парамагнитного резонанса (далее – ЭПР). Форма данных спектров сильно зависит от молекулярной подвижности и физико-химических свойств исследуемого образца.

Поскольку спектры ЭПР pH-чувствительных нитроксильных радикалов имеют довольно сложную форму, то для их анализа применяют специальное программное обеспечение, например, EasySpin для Matlab, ODFR4, NLSL или MultiComponent, которые способны теоретически симулировать сложные спектры, определяя при этом магнитные параметры, такие как: постоянная сверхтонкого взаимодействия, g-фактор. Впоследствии получаемые параметры pH-чувствительных нитроксильных радикалов можно сопоставить со структурными, кислотно-основными и электростатическими свойствами исследуемых материалов.

Применение такого программного обеспечения, не смотря на хорошую точность определения параметров спектров ЭПР, имеет определенные

недостатки, такие как затрачиваемая вычислительная мощность и продолжительное время симулирования в зависимости от сложности формы спектра ЭПР. Применение алгоритмов машинного обучения способно нивелировать данные недостатки численных методов.

Данные алгоритмы довольно активно исследуются и наблюдают попытки их внедрения в анализ тех или иных данных в различных областях спектроскопии, как например в рентгеновской спектроскопии, Рамановской спектроскопии и спектроскопии ядерного магнитного резонанса.

В данной работе была разработана нейронная сеть по типу многослойного персептрона и обучена на определение постоянной сверхтонкого взаимодействия на основе экспериментальных динамических спектров ЭПР pH-чувствительных нитроксильных радикалов. Проведен сравнительный анализ получаемого прогноза разработанной нейронной сети с результатами, получаемыми в ходе симулирования экспериментальных спектров ЭПР специализированным программным обеспечением.

Исследование проведено при поддержке гранта в форме субсидии Министерством науки и высшего образования РФ (соглашение № 075-15-2022-1251 от 13.12.2022).

1. Khlestkin, V. K., Polienko, J. F., et al. Interfacial surface properties of thiol-protected gold nanoparticles: A molecular probe EPR approach. Langmuir, 2008, 24, 609–612.
2. Tikhonov, A. N., Agafonov, R. V., et al. Spin-probes designed for measuring the intrathylakoid pH in chloroplasts. Biochimica et Biophysica Acta-Bioenergetics, 2008, 1777, 285–294.
3. Antonov D.O., Tambasova D. P., et al. Acidic and Electrosurface Properties of Binary TiO2-SiO2 Xerogels Using EPR of pH-Sensitive Nitroxides. Gels, 2021, 7(3).
4. Kovaleva E.G., Molochnikov L.S. et al. Acid–Base Properties of Nanoconfined Volumes of Anodic Aluminum Oxide Pores by EPR of pH-Sensitive Spin Probes. J. Phys. Chem. C, 2016, 120, 5, 2703–2711.
5. Komarov D.A, Ichikawa Y., et al. Anal. Chem., 2018, 90, 23, 13938–13945.

РАЗВИТИЕ IT-ПОДДЕРЖКИ ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО ИССЛЕДОВАНИЯ СВОЙСТВ ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ

Дроздов В.А.[1], Филанович А.Н.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: drovadim@mail.ru

DEVELOPMENT OF IT SUPPORT FOR NUMERICAL INVESTIGATION OF THE PROPERTIES OF THERMOELECTRIC MATERIALS

Drozdov V.A.[1], Filanovich A.N.[1]
[1)] Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia

The need to study the properties of thermoelectric materials is due to the prospects for the development of this industry. This requires appropriate programs that can interact with each other.

Термоэлектрические материалы – это вещества, которые могут преобразовывать тепловую энергию в электрическую и наоборот. Они используются в различных устройствах, таких как термоэлектрические генераторы, термоэлектрические охладители и термопары. Среди термоэлектрических материалов можно выделить множество соединений, включая полупроводники, металлы и некоторые керамические материалы.

Перспективы развития отрасли показывают важность исследований свойств термоэлектрических материалов. Для этого требуется производить первопринципные (ab initio) расчеты электронной структуры и моделирование материалов, на основе которых возможно рассчитывать такие важные для термоэлектрических материалов свойства, как теплопроводность или термоэдс (коэффициент Зеебека).

Для первопринципных расчетов предпочтительно использование программы Quantum ESPRESSO, так как при прочих равных характеристиках среди аналогичных программ она распространяется на бесплатной основе, а также имеет открытый исходный код [1].

Для расчета теплопроводности и других важных свойств термоэлектрических материалов на основе первопринципных расчетов лучше всего использовать программу AICON 2 [2], так как только она имеет возможность такого важного свойства, как коэффициент Зеебека. Данная программа работает быстро, надежна и особенно подходит для высокопроизводительного скрининга термоэлектрических материалов, но она не функционирует на основе данных, рассчитанных в Quantum ESPRESSO.

В данной работе рассматривается круг задач, связанный с адаптацией работы программы AICON 2 на основе данных, рассчитанных в Quantum ESPRESSO.

Была подготовлена версия модуля EMC, входящего в состав AICON 2, в которой описанная ранее проблема была решена путем написания соответствующего метода, позволяющего считывать данные выходных файлов программы Quantum ESPRESSO, а также преобразования кода библиотеки pymatgen. Обновленная версия модуля EMC, как и исходная, реализована на языке программирования Python.

1. Quantum ESPRESSO [Электронный ресурс]. – Режим доступа: https://quantum-espresso.org.
2. AICON2 [Электронный ресурс]. – Режим доступа: https://uspex-team.org/static/file/Fan2021.pdf.

ОБНАРУЖЕНИЕ ПУТИ СЛЕДОВАНИЯ ЛОКОМОТИВА НА ОСНОВЕ СВЕРТОЧНЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

Федоров В.А.[1], Огородникова О.М.[1]
[1)] Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: va.fedorov@outlook.com

TRAIN ROUTE DETECTION BASED ON CONVOLUTIONAL NEURAL NETWORKS

Fedorov V.A.[1], Ogorodnikova O.M.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

In this paper, we propose a method for using convolutional neural networks to segment railway tracks and parts of turnouts in images. Based on the results of such segmentation, the train route was assembled.

Обнаружение объектов на изображении получило большое распространение в сферах, где необходим вести непрерывный контроль за различными процессами. Так и контроль движения локомотива не стал исключением в железнодорожной сфере.

Первоочередной задачей при контроле движения локомотива является обнаружение пути следования на кадрах, полученных с установленных на локомотиве видеокамер.

В нашем исследовании для решения этой задачи были применены методы глубокого обучения.

На ранее сформированном наборе данных была обучена сверточная нейронная сеть на обнаружение различных классов объектов (железнодорожная колея, положения остряков стрелочных переводов и т.д.).

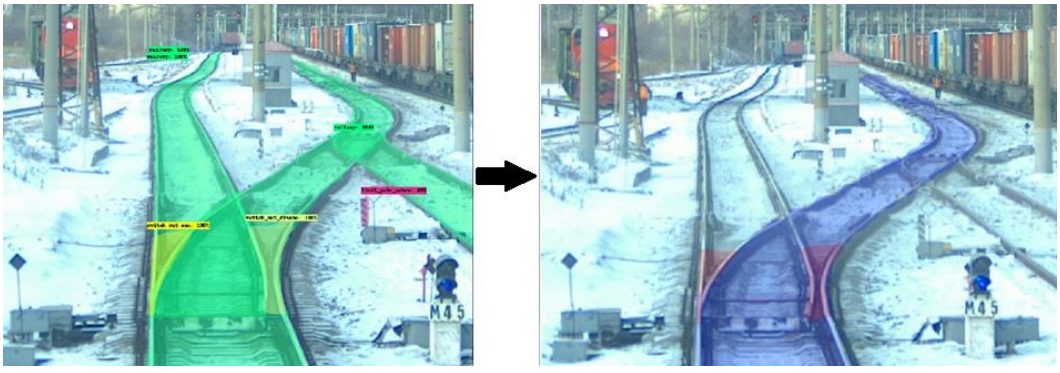


Рис. 1. Построение пути следования

Для построения пути следования локомотива полученные результаты работы нейронной сети обрабатывались и на основе положений остряков стрелочных переводов осуществлялось построение пути следования .

Результаты использования сверточных нейронных сетей продемонстрировали успешное обнаружение объектов при разных погодных условиях и разной освещенности окружающей среды. Полученных результатов обнаружения достаточно для построения пути следования.

1. Gavrilova N.M., Dailid I.A., Molodyakov S.A., Boltenkova E.O., Korolev I.N., Popov P.A. Application of computer vision algorithms in the problem of coupling of the locomotive with railcars // IEEE International Symposium on Consumer Technologies (ISCT). 2018, P.1-

РАЗРАБОТКА МЕТОДА ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНОГО ДЕТЕКТИРОВАНИЯ ОБЪЕКТОВ С ПОМОЩЬЮ PEDD

Галина Е.М.[1], Кашин И.В.[1]
[1)] Уральский Федеральный университет, Екатеринбург, Россия
E-mail: katya.g.m12@gmail.com

DEVELOPMENT OF A METHOD FOR HIGH-PERFORMANCE OBJECT DETECTION USING PEDD

Galina E.M.[1], Kashin I.V.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Object detection is one of the tasks of computer vision. The aim of the work is to create high-performance method for detecting moving objects.

Задача отслеживания объектов на видео является актуальной проблемой, так как до сих пор не существует универсальных методов её решения.

В основе работы лежит алгоритм, реализующий динамику с предварительным распределением – PEDD (Predetermined equilibrium driven dynamics) [1]. Если в стандартной версии алгоритма одной непрерывной линией распределение, заданное графическим изображением и считавшееся статичным, асимптотически восстанавливалось, то в текущей версии линий-агентов может быть неограниченное количество, распределение может быть восстановлено точно, и оно динамически менялось в ходе работы алгоритма.

При смене кадра линии-агенты имеют стойкую тенденцию к перемещению в области наиболее интенсивных изменений, которые чаще всего выражаются в движении объектов. Это свойство легло в основу разрабатываемого сенсора.

Метод обладает высокой чувствительностью к появлению на изображении новых объектов и способен с высокой точностью отслеживать их движение. Для каждого кадра в видеопотоке строится дискретное распределение градиента суммарного статистического недобора по ансамблю. Полученные значения в матрицах распределений интерпретируются как итоговый результат работы сенсора.

Производительность метода не зависит от размера кадра, так как в рамках одной итерации вычисления производятся не над всей матрицей изображения, а только с локальными её областями, в которых находятся агенты, что является преимуществом перед методами, требующими анализа всего кадра.

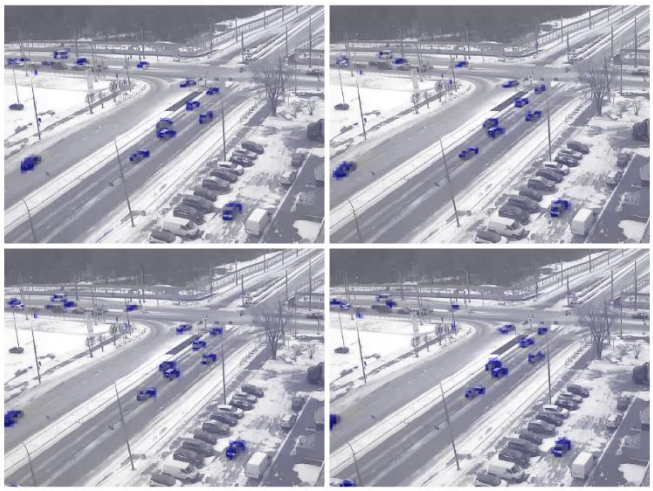


Рис. 1. Пример результата работы метода

1. I. V. Kashin, AIP Conf. Proc. 2313, 030048 (2020)

ОБ ОЦЕНИВАНИИ ЭМЕРДЖЕНТНОСТИ ОНТОЛОГИЙ И ИХ ФРАГМЕНТОВ

Гольдштейн С.Л.[1], Кудрявцев А.Г.[1], Гунбин С.В.[1]
[1)] Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», физико-технологический институт, кафедра технической физики
E-mail: gunbin2308@yandex.ru

ON ESTIMATING THE EMERGENCE OF ONTOLOGIES AND THEIR FRAGMENTS

Goldshtein S.L.[1], Kudryavtsev A.G.[1], Gunbin S.V.[1]
[1)] Federal State Autonomous Educational Institution of Higher Education "Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin", Institute of Physics and Technology, Department of Technical Physics

The ontology of basic concepts is a reliable basis for resolving problematic situations. There are about two dozen criteria for evaluating ontologies, but these criteria consider the ontology from the topological side, slightly affecting the semantics of terms.

Онтология базовых понятий – надёжная основа для разрешения проблемных ситуаций, позволяющая выйти на корректную формулировку задач, связанных с разрешением таких ситуаций [1]. Отсутствие онтологии базовых понятий или её недостаточное качество сдерживает постановку задач на развитие не только арсенала средств самой проблемной области, но и информационно-интеллектуальных компьютерных систем поддержки принятий решений с учётом системного подхода вплоть до системной интеграции.

Поставлена задача: развития оценки системности показателем оценивающем эмерджетность системы и её частей.

Существует приблизительно два десятка критериев оценки онтологий [2]. Приведённые критерии рассматривают онтологию с топологической стороны, слабо затрагивая семантику терминов, но онтология – это система терминов, обеспечивающая системный эффект, появляющийся за счёт взаимодействия элементов исходной или связанной с ней системы и связей между ними. Системный эффект проявляется в обретении системой свойства, которое не содержит не один элемент системы. Эмерджентность - мера системного эффекта. Для оценивания эмерджетности нужно указать цель создания системы, системное свойство, способствующее её достижению и виды связей, обеспечивающих данное свойство.

Оценивают эмерджетность как всей онтологии, так и её фрагментов. Задача - найти уровни, присутствие которых не обеспечивает системного эффекта.

Для оценивания эмерджентности систем может быть применена, например, обобщённая формула Хартли [3].

$\Psi = (\log_2 P)/\log_2 W$

где Ψ – коэффициент эмерджентности для текущего фрагмента, W - количество неделимых элементов системы (в нашем случае концевых вершин иерархии), P - количество всех элементов.

На рисунке 1 показан пример зависимости значения коэффициента эмерджетности от числа вершин их характера, полученный в ходе проведённого нами эксперимента. Приведенный рисунок показывает рост эмерджетности при движении от нижних уровней к верхнему. Так как не наблюдается досрочного выхода эмерджетности к 1, системный эффект обеспечивается всеми уровнями.

Дополнение оценки онтологии критерием эмерджетности позволяет найти лишние уровни, присутствие которых не обеспечивает системного эффекта, что способствует повышению качество онтологий базовых понятий предметных областей и как следствие развитию арсеналов средств самой проблемной области и информационно-интеллектуальных компьютерных систем поддержки принятий решений.

1. Гольдштейн С.Л. Об онтологическом пространстве системной интеграции. / С.Л. Гольдштейн, А.Г. Кудрявцев, С.С. Печеркин // вестник РАЕН – 2014 - №1 – С.138-144
2. Гаврилова Т.А. Субъективные методы оценки онтологий. Материалы Всероссийской конференции с международным участием Знания – Онтологии – Теории (ЗОНТ-09). – 2009. – с. 178–187. 26.
3. Луценко Е.В. Обобщенный коэффициент эмерджентности Хартли как количественная мера синергетического эффекта объединения булеанов в системном обобщении теории множеств / Е.В. Луценко // научный журнал КуГАУ – 2011 - №66 – С.28-39

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И АНАЛИЗ КАЛЬЦИЕВЫХ РЕЛАКСАЦИОННЫХ АВТОКОЛЕБАНИЙ В УСЛОВИЯХ СЛУЧАЙНЫХ ВОЗМУЩЕНИЙ

Качусов С.М.[1], Башкирцева И.А.[1]
[1)] Уральский федеральный университет, Институт естественных наук и математики, Кафедра теоретической и математической физики
E-mail: stepanurfu@gmail.com

MATHEMATICAL MODELING AND ANALYSIS OF CALCIUM RELAXATION SELF-OSCILLATIONS UNDER THE RANDOM PERTURBATIONS

Kachusov S.M.[1], Bashkirtseva I.A.[1]
[1)] Ural federal university, The Institute of Natural Sciences and Mathematics, the Department of Theoretical and Mathematical Physics

A model of calcium dynamics is considered. The stability of the cycles is investigated. The conditions of excitation and suppression of oscillations are revealed for the bistability zones. The relationship between the stability of deterministic and stochastic systems is discussed.

Изменение концентрации кальция играет важную роль в широком круге внутри- и межклеточных процессов. Во многих экспериментальных исследованиях были обнаружены регулярные и хаотические кальциевые осцилляции. Выяснение основных механизмов возникновение кальциевых релаксационных колебаний привлекает внимание как биофизиков, так и математиков.

В докладе рассматривается модель Ли-Ринцеля кальциевой динамики с жесткой бифуркацией рождения цикла, характерной для частотной модуляции. В зоне автоколебательного режима исследуется устойчивость аттракторов и стохастические переходы, вызываемые случайными флуктуациями параметров кальциевых каналов. Выявлена степень устойчивости системы в зоне существования предельных циклов. Для зоны сосуществования устойчивого равновесия и устойчивого предельного цикла выявлены условия, при которых случайные возмущения могут возбуждать спайковые осцилляции из равновесного режима и, наоборот, подавлять колебания больших амплитуд. Найдена взаимосвязь устойчивости детерминированной и стохастической систем в зоне релаксационных автоколебаний. Для параметрического анализа этих явлений используются характеристические показатели, статистики межспайковых интервалов и аппарат функции стохастической чувствительности.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (№ 21-11-00062).

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (№ 21-11-00062).

1. G. Dupont. Models of calcium signalling. New York: Springer Science, 2016.
2. Y.-X. Li, J. Rinzel. Equations for InsP3 receptor-mediated [Ca2+]i oscillations derived from a detailed kinetic model: a Hodgkin-Huxley like formalism Journal of Theoretical Biology, 166:4 (1994), 461-473.
3. I. Bashkirtseva, A.B. Neiman, L. Ryashko. Stochastic sensitivity analysis of the noise-induced excitability in a model of a hair bundle Phys. Rev. E, 87 (2013), 052711.

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ВРАЩАЮЩАЯСЯ ВОЛНА В ТОНКОМ СЛОЕ ВОДЫ. ЧИСЛЕННЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

Керекелица И.В.[1], Мартюшев Л.М.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: ivan.kerekelica@mail.ru

TEMPERATURE ROTATING WAVE IN A THIN LAYER OF WATER. NUMERICAL EXPERIMENT

Kerekelitsa I.V.[1], Martyushev L.M.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The convection of water in a cylinder, the bottom of which is at a constant temperature, and heat removal occurs from the upper surface, is numerically studied. A temperature wave was detected in a small range of container sizes with a frequency of about 0.1 Hz, rotating parallel to the surface.

В тонких слоях жидкости с открытой верхней поверхностью, при подогреве снизу, образуются различные структуры благодаря конвекции [1]. Такие структуры можно легко наблюдать с помощью тепловизионной камеры [2]. Численное моделирование - удобный современный способ анализа конвективных структур. В настоящей работе была поставлена цель численно исследовать в пакете COMSOL систему, которая экспериментально и численно была предварительно изучена в работах [2,3].

Моделировался небольшой контейнер с водой (диаметр 90 мм, высота от 6 до 15 мм) с температурой дна и стенок от 28 до 47 °C. Свободная поверхность воды граничила воздухом при комнатных условиях. На верхней поверхности использовалось условие прилипания, моделирующее влияние адсорбционной примеси.

В процессе расчетов было обнаружено интересное численное решение: возникновение в горизонтальной плоскости воды изменения температуры в виде волны, вращающейся с постоянной угловой скоростью относительно центра контейнера (см. рис. 1). Наблюдаемое “вращение” температурного поля является следствием самоорганизации обычных термогравитационных вихрей.

Важным условием образования волны, является одновременный нагрев как стенок, так и дна контейнера. Если сохранять нагретой лишь дно, а стенки оставить при температуре окружающей среды (либо наоборот), то никаких волн не образуется.

Общий тепловой поток с поверхности жидкости для исследованного случая оказывается равным примерно 900 Вт/м2. Этот теплоотвод состоит из потоков энергии благодаря испарению (83%), конвекции (16%) и излучения (1%). Как

показал расчет, если исключить из теплоотвода испарение или конвекцию, то температурная волна исчезает. Исключение потока излучения не оказывает влияние на существование вращающейся волны.

Обнаруженное волновое поведение требует дальнейшего исследования, в том числе подтверждения в экспериментах на воде с различными адсорбирующимся на поверхности примесями.

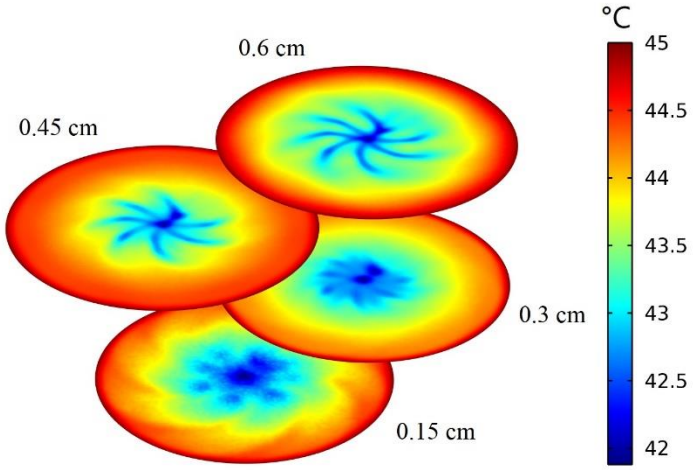


Рис. 1. Распределение температуры “вихря” по глубине.

1. M. C. Navarro, A. M. Mancho, H. Herrero, Chaos 17, 023105 (2007).
2. D.A. Rusova, L.M. Martyushev, AIP Conf. Proceed. 2174, 020162 (2019).
3. I.V. Kerekelitsa, K.V. Zvonarev and L. M. Martyushev, AIP Conf. Proceed. 00172 (2021).

ПОСТРОЕНИЕ ЦИФРОВОГО ДВОЙНИКА НЕЙРОНОВ МОТОРНОЙ КОРЫ МЫШИ

Кашин И.В.[1], Хасанова А.С.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
E-mail: adelina241298@yandex.ru

BUILDING A DIGITAL TWIN OF MOUSE MOTOR CORTEX NEURONS

Kashin I.V.[1], Khasanova A.S.[1]
[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia B. N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia

The approach used in the study allows us to consider the neuronal activity of the mouse motor cortex nerve cell as a desire for some dynamic balance, which is interpreted as a calm relaxed mode.

На сегодняшний день, в мире существует множество различных вариантов моделирования динамики мозга. В основном, биологически приближенные модели обязательно сложны и обычно имеют большое количество параметров. В работе рассматривается подход, позволяющий, максимально приблизить спроецированного цифрового двойника к реальной активности нервной клетки, используя только диагностические снимки нейронов моторной коры мозга мыши.

Используя модифицированную версию алгоритма PEDD (метод приближенной динамики), который осуществляет асимптотическое приближение произвольно заданного распределения к эталонному. Подход, используемый в исследовании, позволяет рассмотреть нейронную активность нервной клетки моторной коры мыши, как стремление к некоторому динамическому равновесию, которое трактуется как спокойный релаксированный режим. Так же, рассматривается моделирование взаимодействия из вне, как разница между текущим и эталонным распределением, которое может быть наделено смыслом локальных возбуждений на систему. Главная польза, ожидаемая от этой симуляции, показать, как именно будет распределяться нейронная активность в модели, при симуляции воздействия на систему из вне, или отсутствии такового.

1. https://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/5.0032348

САМООРГАНИЗАЦИЯ В МОДЕЛЯХ РЕАКЦИИ-ДИФФУЗИИ НА ПЛОСКОСТИ: ТЬЮРИНГОВСКИЕ ПАТТЕРНЫ И МУЛЬТИСТАБИЛЬНОСТЬ

Колиниченко А.П.[1], Ряшко Л.Б.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: kolinichenko.ale@gmail.com

SELF-ORGANIZATION IN TWO DIMENSIONAL REACTION-DIFFUSION MODELS: TURING PATTERNS AND MULTISTABILITY

Kolinichenko A.P.[1], Ryashko L.B.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

In this report a reaction-diffusion model with two dimensional variables is considered. It is shown that in the zone of Turing instability non-homogeneous stable patterns exist. Multistability of the system is investigated for varying diffusion intensity. Pattern complexity is shown and discussed.

Изучение механизмов самоорганизации в нелинейных моделях остается одним из привлекательных направлений исследования в современной науке [1]. В разных разделах физики, химии и биологии встречаются явления, способствующие образованию качественно нового порядка.

Одно из таких явлений — диффузионная неустойчивость [2] — способствует формированию пространственно-неоднородных устойчивых паттернов.

Важным направлением для исследования данного феномена является параметрический анализ — влияние параметров системы на характер и количество сосуществующих структур-паттернов, их геометрическое разнообразие и сложность [3]. Другое направление — влияние случайных возмущений на процесс формирования паттернов и

возможность перехода между ними [4-5].

Цель данной работы — исследование влияния свойств пространственной области на мультистабильность системы и вид структур. Модель реакции-диффузии, ранее рассмотренная на одномерном отрезке, исследована на замкнутой квадратной области.

Отмечены качественные структурные различия паттернов. Также проведено исследование зависимости геометрического разнообразия

паттернов от интенсивности диффузии. На данных компьютерного моделирования обсуждаются возможные способы фиксирования степени мультистабильности системы.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №21-11-00062).

1. G. Nicolis, I. Prigogine, Self-Organization in Nonequilibrium Systems (Wiley, New York, 1977).
2. A. Turing, Philos. Trans. R. Soc. Lond. B. Biol. Sci. 237, 37–72 (1952).
3. A. P. Kolinichenko, L. B. Ryashko, Izv. IMI UdGU, 53, 73–82 (2019).
4. A. P. Kolinichenko, A. N. Pisarchik and L. B. Ryashko, Philos. Trans. Royal Soc. A, 378(2171), 20190252 (2020).
5. I. Bashkirtseva, A. Kolinichenko and L. Ryashko, Mathematics, 11(2), 451, (2023).

АЛГОРИТМ ГЕНЕРАЦИИ ДЕЙСТВЕННЫХ РЕКОМЕНДАЦИЙ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ПРОБЛЕМЫ ПЕРЕГРУЖЕННОСТИ АВТОМОБИЛЬНЫХ ДОРОГ

Котляренко Н.А.[1], Кашин И.В.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина
E-mail: 0966801k@gmail.com

ALGORITHM FOR GENERATING EFFECTIVE RECOMMENDATIONS TO SOLVE THE PROBLEM OF CONGESTION OF HIGHWAYS

Kotlyarenko N.A.[1], Kashin I.V.[1]
[1)] Ural Federal University named after the First President of Russia B.N. Yeltsin

This project aims to solve the problems of congestion of highways through an algorithm for generating effective recommendations based on PEDD [1]

Данный проект призван решить проблему перегруженности автомобильных дорог по средствам выдачи действительных рекомендаций, основанных на симуляции, которая в свою очередь разработана на основе алгоритма PEDD.

Результат данного проекта, это выдача каждому пользователю индивидуальной рекомендации, которая основана на симуляции, включающей в себя как виртуальных пользователей, так и настоящих. Также индивидуальные рекомендации снижают наружность дорог во время максимальной нагрузки благодаря учёту количества пользователей на различных участках движения и их последующего равномерного распределения.

Мы выдаём пользователям индивидуальные маршруты полученные по средствам применения симуляции движения на карте реального города основанной на PEDD. В алгоритм загружается карта города, и он строит допустимые зоны для движения (дороги), после чего в симуляцию вводятся агенты, которые имеют случайные точки приоритета для движения, а именно одну на окраине (место жительства агента) и одну в центре (место работы агента), далее после того, как агенты двигаются по карте, продолжительное время вводится аватара маршрут которого пользователь выставил сам. Аватар двигается по карте и пристраивает маршруты для движения учитывая распределение, полученное от ранее работавших в данной симуляции агентов. После чего мы получаем картину движения аватара и выдаём индивидуальную рекомендацию для движения пользователя основанную на данных получаемых из симуляции.

1. I. V. Kashin, AIP Conf. Proc. 2313, 030048 (2020)

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТАНГЕНЦИАЛЬНОЙ УЛЬРАФИЛЬТРАЦИИ НА ПРИМЕРЕ ВОДЫ: ФОКУС НА РАЗРАБОТКУ ЦИФРОВОГО ДВОЙНИКА

Козлов Н.В.[1], Комарова В.А.[1], Лаптев Р.А.[1], Черепанов А.Н.[1]
[1)] Уральский Федеральный Университет
E-mail: nkzfcm3@gmail.com

SIMULATION OF THE PROCESS OF TANGENTIAL ULRAFILTRATION OF WATER: FOCUS ON THE DEVELOPMENT OF A DIGITAL TWIN

Kozlov N.V.[1], Komarova V.A.[1], Laptev R.A.[1], Cherepanov A.N.[1]
[1)] Ural Federal University

The paper presents the developed approach and the results of modeling the process of tangential ultrafiltration, which can be applied in performing a number of tasks at industrial sites in the chemical, food, and mining industries.

Применение тангенциальной фильтрации в настоящее время становится все более популярным в ряде технологических процессов реальных производств. Такая технология уже сегодня реализуется на предприятиях, связанных с химической промышленностью и горнодобывающей отраслью. Такое распространение обусловлено тем, что, в отличие от тупиковой фильтрации, данная технология увеличивает в разы срок жизни фильтрующих установок. Разработанное инженерное решение, цифровой двойник которого создается и частично представлен в данной работе, может быть использован в горнодобывающей, химической (производство калийных удобрений, нефтедобыча и др.), пищевой, аграрной отрасли, что уже было проделано на практике авторами статьи. Применение керамических фильтров, в отличие от полимерных аналогов, увеличивает срок службы еще больше: вплоть до десятков лет [1].

Цель данной работы – первый шаг к разработке цифрового двойника, который планируется использовать для первичного оценивая скорости фильтрации без использования экспериментальных измерений в полностью удаленном режиме. Данная работа представляет результаты расчетной модели в задаче фильтрации воды с дополнительным исследованием независимого влияния основных характеристик системы, влияющих на скорость фильтрации.

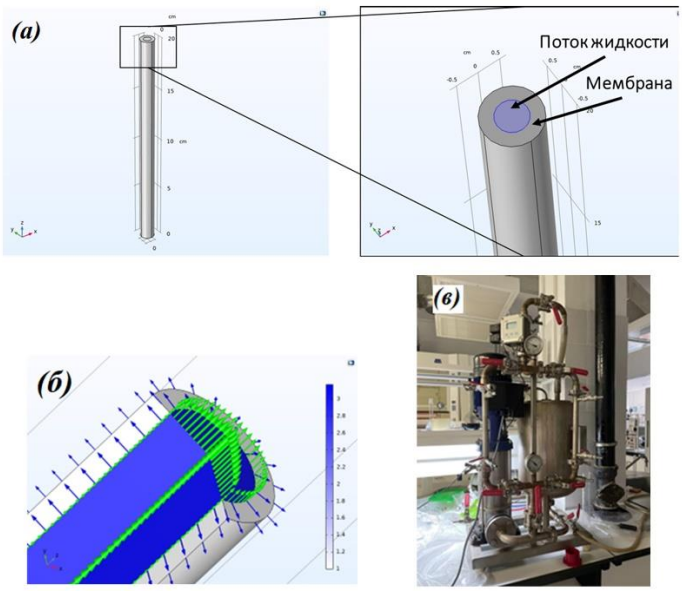


Рис. 1. Рисунок 1 (а) – Компьютерная модель для расчета скорости фильтрации жидкости. (б) – Схема потоков жидкости, (в) – лабораторная установка тангенциальной фильтрации

Процесс фильтрации был смоделирован в пакете программ Comsol Multyphysics. Расчетная модель включала в себя протекание жидкости по основному контуру и протекание жидкости через мембрану в направлении от центра трубы. Моделирование было произведено путем численного решения уравнения Навье-Стокса, объединенного с решением уравнения Дарси. На рисунке представлена схема протекания потоков жидкости при тангенциальной фильтрации.

На примере воды было получено хорошее сравнение теории с экспериментом. Определенная проницаемость мембраны позволяет использовать в дальнейшем это значение для расчета скорости фильтрации на любом растворе. Гидродинамические величины, рассчитанные с помощью данной модели, очень хорошо совпадают с экспериментом.

В комнатных условиях вода может фильтроваться на уровне 3-3.5 миллилитров в секунду, что соответствует 86 литрам в сутки с одной мембраны. Повышение температуры очень сильно влияет на фильтрацию воды и может вносить определяющий вклад в работоспособность и качество работы. При повышении плотности и уменьшении вязкости скорость фильтрации будет увеличиваться.

1. Zsirai T. et al. Ceramic membrane filtration of produced water: Impact of membrane module //Separation and Purification Technology. – 2016. – Т. 165. – С. 214-221.

БОРЬБА С ИОХВ КАК ЗАДАЧА ОБ ОНТОЛОГИИ БАЗОВЫХ ПОНЯТИЙ О ПОМЕХЕ УПРАВЛЕНИЮ

Кузнецова Т.С.[1], Гольдштейн С.Л.[1]
[1)] Уральский Федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: ktatana174@gmail.com

FIGHTING INFECTIOUS COMPLICATIONS OF SURGICAL INTERVENTION AS A TASK ON THE ONTOLOGY OF THE BASIC CONCEPTS OF INTERFERENCE TO CONTROL

Kuznecova T.S.[1], Goldstein S.L.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Infectious complications of surgical intervention during and after open heart surgery can lead to serious consequences. The main function of this work is to control interference that contributes to the occurrence of infectious complications of surgical intervention.

Инфекционные осложнения в области хирургического вмешательства (ИОХВ) существенная проблема в клиническом, социальном и экономическом аспектах.

С целью раскрытия поставленной задачи были выделены следующие ключевые слова для поиска информации: управление, мониторинг, инфекция области хирургического вмешательства (ИОХВ), профилактика, диагностика.

Управление борьбой с ИОХВ требует соответствующих моделей, прежде всего онтологических и управленческих. Предлагаемая нами иерархия базовых понятий приведена на рисунке:

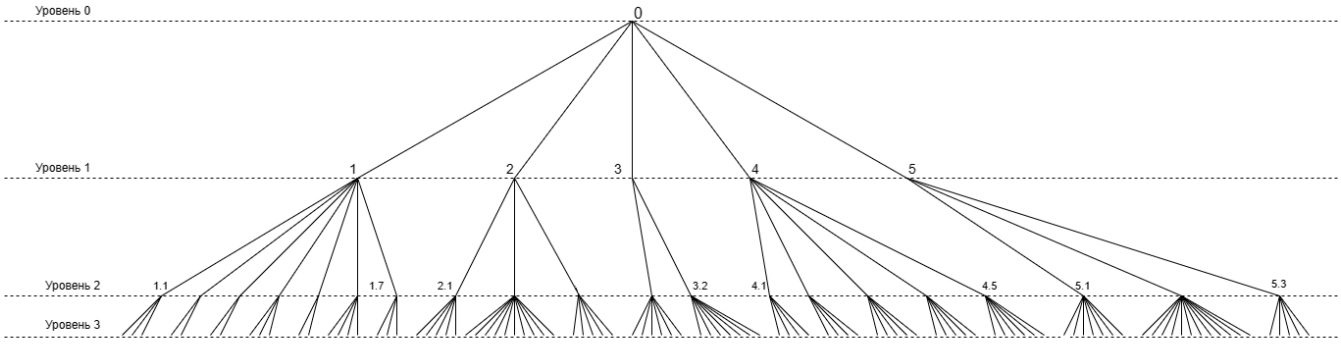


Рис.1-Фрагмент иерархии базовых понятий к термину «Контруправление в борьбе с ИОХВ» (0)

1. Помехи в управлении борьбой с ИОХВ
1.1 материальные
1.1.1 жидкие

1.1.2 твердые
1.1.3 газообразные
1.2 энергетические
1.2.1 температура операционной
1.2.2 освещение операционной
1.3 людские
1.3.1 от пациента
1.3.2 от персонала мед. учреждения
1.4 временные
1.4.1 преждевременность
1.4.2 опаздывание
1.4.3 дискретность
1.5 информационные
1.5.1 недостаточность информации
1.5.2 избыток информации
1.6 финансовые
1.6.1 снижение государственного финансирования
1.6.2 изменение курсов валют
1.6.3 кредит
1.6.4 неплатежеспособность населения
1.7 административные
1.7.1 невозможность решения отдельных вопросов путем переговоров и как результат – обращение пациентов медицинской организации и (или) медицинской организации в судебные органы для их урегулирования
1.7.2 нарушения клиентами (пациентами, законными представителями пациентов) и контрагентами медицинской организации условий договоров
1.7.3 несовершенство правовой системы (отсутствие достаточного правового регулирования, противоречивость законодательства РФ, его подверженность изменениям, в том числе в части «несовершенства» методов государственного регулирования и (или) надзора)
2. Фиксация помех (критерии оценки качества медицинской помощи)
2.1 предоперационный этап
2.1.1 зонирование операционной
2.1.2 коррекция нутритивной недостаточности
2.1.3 принятие душа пациентом накануне операции
2.1.4 стрижка электрическим клиппером
2.1.5 обработка мазью 2% мупироцина
2.2 пери- и интраоперационный этап
2.2.1 для подготовки операционного поля использован спиртосодержащий антисептик
2.2.2 руки хирурга обработаны спиртосодержащим антисептиком
2.2.3 использованы стерильные перчатки

2.2.4 применялись стерильное тканое белье и хирургические халаты

2.2.5 использовалась стерильная антимикробная йодосодержащая пленка

2.2.6 проведена периоперационная антибиотикопрофилактика

Один из возможных когнитивных маршрутов связывает качества борьбы с ИОХВ с качеством управления этим процессом. Мы исходим из общего представления о модели управления в виде:

$dx/dt = a_1x - a_2y + a_3f(t) + a_4U_1(t) + a_5V_1(t)$,

$dy/dt = b_1y - b_2x + b_3g(t) + b_4U_1(t) + b_5V_1(t)$,

где x, y - показатели качества (x - без ИОХВ, y - с ИОХВ),

a, b - коэффициенты,

U, V – управление, помехи,

t – время.

1. Stepin AV. Local infectious complications in cardiac surgery: etiology and the role of antimicrobial prophylaxis. Pirogov Russian Journal of Surgery = Khirurgiya. Zurnal im. N.I. Pirogova. 2022;(6):40-47. (In Russ.) https://doi.org/10.17116/hirurgia202206140

РАСЧЕТ ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПРОМЫШЛЕННЫХ СОЛЕЙ

Лаптев Р.А.[1], Комарова В.А.[1], Козлов Н.В.[1], Черепанов А.Н.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого президента России Б. Н. Ельцина
E-mail: r.laptev2000@gmail.com

CALCULATION OF HYDRODYNAMIC PROPERTIES OF INDUSTRIAL SALTS

Laptev R.A[1], Komarova V.A.[1], Kozlov N.V[1], Cherepanov A.N[1]
[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia B. N. Yeltsin

A simple model for calculating the density and viscosity of salts and their mixtures is proposed.The values of density and viscosity were calculated at different concentrations of NaCl and KCl, as well as their mixtures at 293 K. The calculation results are compared with experimental data.

Для оценочного и количественного расчета гидродинамических процессов необходимо знать характеристики, определяющие индивидуальные свойства жидкости, такие как плотность и вязкость. Особенно часто задача оценочного расчета производительности встречается при разработке и оптимизации инженерного оборудования для работы с жидкостями под конкретные технические требования и особенности. Необходимость в проведении предварительной оценки производительности, которая обычно заключается в работе с жидкостями из пробной партии на лабораторном стенде, сегодня может быть частично решена путем создания цифровых двойников [1].

В данной работе предложена упрощенная модель, согласно которой раствор солей рассматривается как смесь солей в их предельной концентрации и чистой воды. Таким образом, для определения вязкости и плотности раствора необходимо знать их массовые доли, а также плотность и вязкость солей при данной температуре в их предельной растворимости, данная информация содержится в различных справочниках, эта модель применима для растворов неассоциирующих веществ, поэтому применима для широкого спектра практических задач, встречающихся, например в калийном, металлургическом, нефтяном производстве. Данный подход упрощает расчеты, так как не требует введения нескольких коэффициентов, не имеющих определенного физического смысла. Расчеты были проведены для каждой соли в отдельности и их смеси в разных соотношениях, данные сравнены с их реальными значениями. Погрешность расчета плотности не превышает 0.3%, для вязкости ошибка составляет около 5 %.

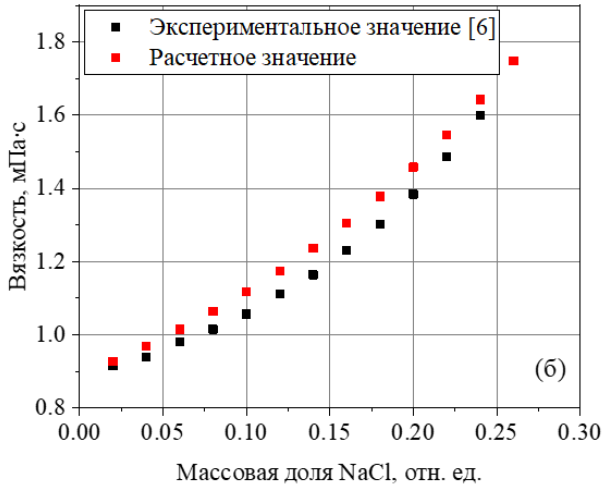


Рис. 1. Зависимость вязкости от концентрации NaCl в воде

Результаты для вязкости представлены на рисунке, зависимость имеет нелинейный характер, что связано с различными механизмами взаимодействия ионов с растворителем и между собой. Наименьшее расхождение с экспериментальными значениями наблюдается при малых и близких к предельным концентрациях. При увеличении массовой доли NaCl до предельной концентрации, вязкость увеличивается почти в 2 раза.

В ходе работы проверена модель для расчета гидродинамических параметров смеси двух солей в воде, полученные данные сходятся со значениями, полученными в других работах. Составлена таблица для различных соотношений хлорида натрия и хлорида калия в воде. Она будет использована для предварительной оценки производительности технологического оборудования в решении задач химической промышленности.

1. Царев М. В., Андреев Ю. С. Цифровые двойники в промышленности: история развития, классификация, технологии, сценарии использования //Известия высших учебных заведений. Приборостроение. – 2021. – Т. 64. – №. 7. – С. 517-531.

IP-ЯДРО АППАРАТНОГО УМНОЖИТЕЛЯ ЦЕЛЫХ ЧИСЕЛ ДЛЯ СБИС ФУНКЦИОНАЛЬНО-ОРИЕНТИРОВАННОГО ПРОЦЕССОРА

Лисовский Д.А.[1], Лукин Н.А.[1], Гусев А.В.[1]
[1)] Уральский Федеральный Университет, Екатеринбург, Россия
E-mail: danil.lisovsky@yandex.ru

IP-CORE OF HARDWARE MULTIPLIER OF INTEGER FOR VLSI FUNCTION-ORIENTED PROCESSOR

Lisovsky D.A.[1], Lookin N.A.[1], Gusev A.V.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The article discusses using the algorithm for parallel multiplication of integers in two's complement code for increasing the speed of the multiplication in function-oriented processors. The results of prototyping a multiplier circuit using FPGA technology are presented.

Вычислительные системы, применяемые в различных отраслях науки и техники (суперкомпьютеры [1], встраиваемые системы [2], в частности, бортовая аппаратура систем управления [3]), объединяет то, что все они требуют дальнейшего увеличения производительности. Анализ тенденций развития микроэлектроники выявляет следующие методы повышения эффективности вычислений:

- повышение тактовой частоты работы модулей системы;
- многопоточная обработка данных;
- аппаратная реализация наиболее востребованных функций;

Первый метод является неприемлемым для большинства встраиваемых и бортовых систем, ввиду значительного роста потребляемой мощности аппаратуры и, как следствие, ухудшению массо-габаритных характеристик аппаратуры.

Распараллеливание вычисления на базе многопроцессорных вычислительных систем приводит к дополнительным расходам и ограничениям, связанных с увеличением количества применяемых в них процессоров [4].

Использование аппаратной реализации функций, требуемых для системы вычислений, является рациональным решением, так как не приводит к повышению частоты работы элементов и лишь незначительно увеличивает число процессоров при существенном повышении производительности. Основными вычислительными элементами в таком подходе становятся функционально-ориентированные процессоры (ФОП), ключевая особенность которых – аппаратная поддержка сложных арифметических преобразований и математических функций [5].

Одним из наиболее актуальных применений ФОП являются бортовые бесплатформенные инерциальные навигационные системы (БИНС). Анализ основных алгоритмов бесплатформенной навигации, включающих в свой состав вычисление параметров ориентации, пересчет приращений составляющих кажущейся скорости из связанной системы координат в инерциальную и учет систематических погрешностей, показывает, что базовыми вычислительными операциями являются операции векторно-матричной алгебры. В алгоритмах БИНС наиболее часто используется операция класса скалярного произведения векторов. В качестве компонентов векторов используются выходные коды датчиков угловых скоростей и акселерометров, а также промежуточные параметры алгоритмов.

Вид базовой операции определяет необходимость первоочередной реализации операции умножения. Режим жесткого реального времени определяет минимальное время выполнения этой операции. Это, в свою очередь, приводит к необходимости аппаратной реализации собственно процесса образования произведения. В данной работе рассматриваются аспекты проектирования аппаратного модуля быстрого умножения «MULT64», предназначенного для реализации умножения 64-битных операндов, заданных в прямом и дополнительном кодах (дополнение вида «2`s complement code»). Структурная схема модуля приведена на рисунке. В частности, обсуждается реализация главной части процессорного ядра – умножителя «MULT», представляющего собой параллельный умножитель целых знаковых и беззнаковых чисел на основе систолической матрицы из функциональных элементов.

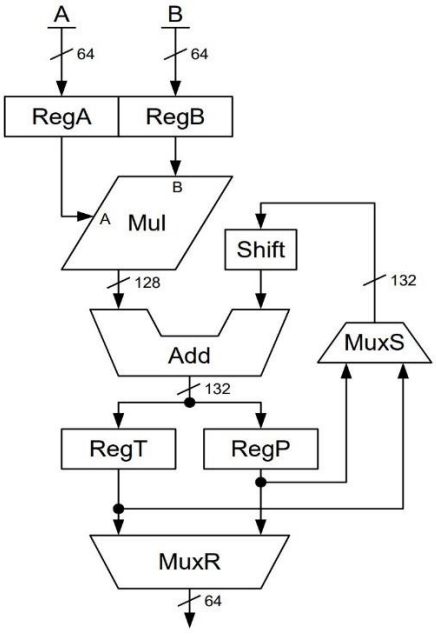


Рис. 1. Структурная схема модуля аппаратного умножения MULT64

1. Левин В. К. Тенденции развития суперкомпьютеров //Computational nanotechnology. – 2014. – №. 1.
2. Глубоков А., Роберт К. Многоядерные вычисления во встраиваемых системах //Компоненты и Технологии. – 2010. – №. 102. – С. 76-78.
3. Есиновский А. В., Маркин А. А., Яцук Г. Е. Направления совершенствования бортовых цифровых вычислительных систем //Ракетно-космическая техника. – 2012. – Т. 1. – №. 1. – С. 15-15.
4. Мирошников А. С. Система управления параллельной обработки данных в локальных вычислительных сетях //Дисс. канд. техн. наук. Владикавказ. – 2000.
5. Лукин Н. А. Функционально-ориентированные процессоры ключевые компоненты встроенных суперкомпьютеров для систем реального времени //Известия Южного федерального университета. Технические науки. – 2014. – №. 12 (161). – С. 52-66.

РАСПРЕДЕЛЕННАЯ СРЕДА ПРОЕКТИРОВАНИЯ ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ОБОРУДОВАНИЯ НА БАЗЕ ОТЕЧЕСТВЕННОГО ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ

Огородников А.И.[1]
[1)] Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: a.i.ogorodnikov@urfu.ru

DISTRIBUTED ENVIRONMENT FOR DESIGN OF TECHNOLOGICAL EQUIPMENT BASED ON RUSSIAN SOFTWARE

Ogorodnikov A.I.[1]
[1)] Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia

In this work, a distributed design of technological equipment was organized for the implementation of educational projects by students. The integrated CAD\CAE\CAM\PLM environment was created on the basis of software from the ASCON company. The project files were uploaded to a virtual machine.

Распределенные системы проектирования и производства являются ключевым направлением развития современного цифрового производства [1]. В этом контексте важным типом технологического оборудования являются промышленные роботы, которые определяют цифровое производство и переход к Индустрии 4.0.

В данной работе на базе программного обеспечения CAD\CAE\CAM\PLM от Группы компаний АСКОН (г. Санкт-Петербург) организовано студенческое проектирование технологического оборудования в частном облаке УрФУ. Актуальность работы обусловлена необходимостью обеспечить качественную реализацию проектной деятельности с возможностью дистанционного выполнения командами студентов сложных конструкторских проектов приборостроения и машиностроения. Файлы проектов располагаются на выделенной виртуальной машине УрФУ, где происходит сборка и упорядочение конструкторской документации в рамках электронной структуры изделия.

В весеннем семестре 2023 года созданные облачные сервисы применены для выполнения проектов студентами магистратуры по заданию от ПАО «Машиностроительный завод им. М.И. Калинина». В рамках проекта совместно с предприятием разработана типовая электронная структура изделия для проектирования линейки промышленных манипуляционных роботов.

Специфика проектирования современного технологического оборудования заключается в междисциплинарном содержании, поскольку объектом проектирования является мехатронная система. Соответственно, при проектировании параллельно с классическим конструированием машиностроительного изделия ведется разработка интеллектуальной системы

управления и решаются междисциплинарные задачи точного позиционирования. Проблема организации междисциплинарного проектирования заключается в том, что текущие стандарты Единой системы конструкторской документации подробно регламентируют конструирование механических узлов и только в последней редакции обозначают возможность совместного проектирования механической системы и системы управления в рамках интегрированной программной среды. Сложность и новизна выполненной работы заключается в объединении разнородных программ и типов конструкторско-технологической документации. В сформированную структуру входят электронные конструкторские документы на этапе эскизного проекта, которые представляют объемную модель манипулятора, чертежи, технологические процессы, схемы, расчетное обоснование деталей и приводов в параметрическом виде. Для управления жизненным циклом изделия выбрана, установлена и настроена в облаке СУБД PostGreSQL, которая в отличие от аналогов способна работать под ОС Linux и соответствует общей тенденции перехода к свободному программному обеспечению.

Работа по программно-аппаратному и методическому обеспечению проектной деятельности студентов магистратуры выполнена в рамках проекта "Создание межвузовской распределенной среды проектирования на базе отечественного программного обеспечения для реализации качественного проектного обучения" - победителя грантового конкурса Стипендиальной программы Владимира Потанина 2022/2023.

1. Огородников А. И. Интеграция программ CAE и CAM в составе распределенного производства // Физика. Технологии. Инновации ФТИ-2021: Тезисы докладов VIII Международной молодежной научной конференции (Екатеринбург, 17-21 мая 2021 г.). Екатеринбург: УрФУ, 2021, С.947-948.

РАВНОВЕСНЫЕ И КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ РЕЖИМЫ В АВТОКАТАЛИТИЧЕСКОМ РЕАКТОРЕ СО СЛУЧАЙНЫМ ВОЗМУЩЕНИЕМ

Павлецов М.М.[1], Перевалова Т.В.[1]
[1)] Уральский Федеральный Университет
E-mail: evlucid@gmail.com

EQUILIBRIUM AND OSCILLATORY REGIMES IN AN AUTOCATALYTIC REACTOR WITH RANDOM PERTURBATION

Pavletsov M.M.[1], Perevalova T.V.[1]
[1)] Ural Federal University

The paper considers a stochastic model of thermokinetic reaction in a well-mixed reactor. A probabilistic analysis of complex oscillation modes is carried out. Noise-induced transitions, generation of high-amplitude oscillations, and the transition from regular to chaotic oscillations are described.

В работе рассматривается стохастический вариант модели, описывающей термокинетические реакции в реакторе идеального смешивания. Выбранная модель [1], задаваемая системой дифференциальных уравнений, описывает автокаталитическую схему превращений на поверхности катализатора, где переменными являются концентрация вещества и температура.

В детерминированном случае проведен параметрический анализ существования и устойчивости равновесных и колебательных режимов. Проведенный анализ позволил описать бифуркационные сценарии и выявить зоны изменения параметра скорости реакции, в которых наблюдается мультистабильность – сосуществование нескольких устойчивых равновесий, а также устойчивого равновесия и предельного цикла.

Стохастический вариант модели был изучен как методами прямого численного моделирования, так и с использованием функции стохастической чувствительности [2, 3]. Данный подход позволяет проводить конструктивное описание индуцированных шумом явлений. В работе получены результаты исследования стохастической чувствительности аттракторов на вносимые случайные возмущения. На ряду с ним, проведен вероятностный анализ сложных осцилляционных режимов, описаны индуцированные шумом переходы между аттракторами, генерация большеамплитудных колебаний и переход от регулярных к хаотическим автоколебаниям.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Программы развития Уральского федерального университета имени первого Президента России Б.Н.

Ельцина в соответствии с программой стратегического академического лидерства "Приоритет-2030".

1. Быков В.И., Цыбенова С.Б. Нелинейные модели химической кинетики // КРАСАНД Москва, 2011, 400 стр.
2. Bashkirtseva I. Stochastic sensitivity analysis of mixed-mode oscillations in kinetics of the flow reactor // Mathematical Methods in the Applied Sciences — 2021. — Т. 44, № 16. — С. 12047-12057.
3. Ryashko L., Bashkirtseva I. Stochastic Bifurcations and Excitement in the ZS-Model of a Thermochemical Reaction // Mathematics — 2022. — Т. 10, №6. — С. 960.

УТОЧНЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТОВ НЕЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ МЕТОДОМ ЛЕВЕНБЕРГА-МАРКВАРДТА

Петухова В. В.[1], Огородников А. И.[1]
[1)] Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: petukhova.viktoria@bk.ru

REFINEMENT OF THE COEFFICIENTS OF THE NONLINEAR HEAT CONDUCTIVITY EQUATION BY THE LEVENBERG-MARQUARDT METHOD

Petukhova V. V.[1], Ogorodnikov A. I.[1]
[1)] Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia

In this paper, the casting technology was simulated in the LVMFlow software. The properties of the sand mold are unknown. To refine them, the algorithm for solving the inverse heat conduction problem by the Levenberg-Marquardt method has been developed and implemented in the SciLab software.

Математической основой для компьютерной симуляции технологических процессов, как правило, являются дифференциальные уравнения в частных производных. В случае тепловых воздействий решается уравнение теплопроводности, коэффициентами которого являются теплофизические свойства материалов [1]. В нелинейном уравнении теплопроводности коэффициенты представлены функцией температуры и становятся источником недостоверного прогнозирования температурных полей, когда материал нестабилен по составу и структуре. Коэффициенты уравнения теплопроводности для конкретных технологических процессов могут быть уточнены решением обратной задачи теплопроводности [2].

В данной работе рассмотрен технологический процесс литья алюминиевого сплава АК7ч в песчаную форму, изготовленную способом 3D-печати. Компьютерное моделирование технологии литья выполнено в программном комплексе LVMFlow (разработчик – НПО МКМ, г. Ижевск), где на расчетной сетке решается прямая задача теплопроводности методом контролируемых объемов. Неизвестными и нестабильными являются свойства песчаной смеси, содержание влаги в которой быстро меняется после приготовления в зависимости от ряда неизученных параметров.

Свойства песчаной смеси уточнены решением обратной задачи теплопроводности. Для решения обратной задачи выбран метод Левенберга-Марквардта, поскольку метод не требует введения данных о производных по координате, и алгоритм решения не привязан к пространственной геометрии технологической оснастки.

Разработан алгоритм решения обратной задачи теплопроводности методом Левенберга-Марквардта. Разработанный алгоритм реализован в программной среде SciLab, где имеется достаточный инструментарий для матричных вычислений. Эффективность работы алгоритма проверена на тестовой задаче, в которой квази-экспериментальная температурная кривая получена в компьютерном моделировании со свойствами песка из базы данных LVMFlow. Исходная расчетная температурная кривая получена со значениями теплопроводности и удельной теплоемкости песчаной смеси, равными константам. Разработанный алгоритм восстановил свойства материала от исходных расчетных данных до квази-экспериментальных за 3 итерации, совместив температурные кривые – расчетную и квази-экспериментальную.

1. Петухова В. В., Огородников А. И. Решение обратной задачи теплопроводности в компьютерном моделировании технологических процессов // Физика. Технологии. Инновации ФТИ-2022: Тезисы докладов VIII Международной молодежной научной конференции (Екатеринбург, 16-20 мая 2022 г.). Екатеринбург: УрФУ, 2022, С.942-943.
2. Огородников И. Н. Введение в обратные задачи физической диагностики / Екатеринбург: Изд-во Уральского университета, 2017. 128 с.

ПРИМЕНЕНИЕ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ В ИЗУЧЕНИИ МЕХАНИЗМОВ ПЛАВЛЕНИЯ НАНОКРИСТАЛЛОВ ДИОКСИДА УРАНА

Некрасов К.А.[1], Пицхелаури С.С.[1]
[1)] Уральский Федеральный Университет, Екатеринбург, Россия
E-mail: lauri2011@mail.ru

A USAGE OF NUMERICAL SIMULATION IN THE STUDY OF URANIUM DIOXIDE NANOCRYSTALS MELTING MECHANISMS

Nekrasov K. A.[1], Pitskhelaury S.S.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

A study of melting mechanisms of UO2 nanocrystals is done using molecular dynamics, a size dependence of the melting temperature is obtained. The model systems contained 4000 - 380000 ions. The melting was induced by formation of a surface liquid layer at a single (111) face or two adjacent faces.

Методом молекулярной динамики изучены механизмы плавления нанокристаллов диоксида урана в зависимости от размера и температуры, получена зависимость температуры плавления модельных нанокристаллов от размера. Количество частиц, - ионов урана и кислорода, - в рассмотренных нанокристаллах варьировалось от 4000 до 380 000, кристаллы имели равновесную форму усеченного октаэдра [1].

Термически-активируемое плавление отслеживали, используя времена эволюции нанокристаллов до 150 нс. Даже при сравнительно низких температурах, далёких от плавления, на вершинах и ребрах модельных нанокристаллов существовал поверхностный расплав. Плавление во всех случаях начиналось с поверхности, после распространения поверхностного расплава на грани, образованные плоскостями типа (111) [2].

Для кристаллитов, размеры которых превышали 20 000 частиц, существовала область температур, при которых расплавленные грани (111) могли находиться в устойчивом равновесии с кристаллическим объёмом; повышение температуры за пределы этой области приводило к распространению расплава с поверхности в объём [3].

При меньших размерах, зарегистрированы осцилляции поверхностей (111) от кристаллического к расплавленному состоянию и обратно. Для распространения расплава в объём в таких случаях требовалось одновременное расплавление двух соседних граней. Уменьшение размера нанокристаллов от 380 000 до 4000 ионов привело к понижению температуры плавления от 3370 K до 3140 K, в качественном соответствии с экспериментальными данными.

1. S.I. Potashnikov, A.S. Boyarchenkov, K.A. Nekrasov, A.Ya. Kupryazhkin, ISJAEE 8, 43–52 (2007).
2. A.S. Boyarchenkov, S.I. Potashnikov, K.A. Nekrasov, A.Y. Kupryazhkin, Journal of Nuclear Materials 421, 1□8 (2012).
3. K.A. Nekrasov, A.S. Boyarchenkov, Sanjeev K. Gupta, A.Ya. Kupryazhkin, AIP Conference Proceedings, vol. 2142, 02001 (2019)

РАЗВИТИЕ СПОСОБА ОЦЕНИВАНИЯ АНАЛОГОВ ПРИ НАЛИЧИИ ПАТЕНТНЫХ ОПИСАНИЙ

Гольдштейн С.Л.[1], Кудрявцев А.Г.[1], Ранцева Н.С.[1]
[1)] ФГАОУ ВО "Урфу имени Первого Президента России Б.Н. Ельцина"
E-mail: lb.r.o.k@mail.ru

DEVELOPMENT OF A METHOD FOR EVALUATING ANALOGUES IN THE PRESENCE OF PATENT DESCRIPTIONS

Goldstein S.L.[1], Kudryavtsev A.G.[1], Rantseva N.S.[1]
[1)] FSAOU VO "Urfu named after the First President of Russia B.N. Yeltsin"

The development of a method for evaluating analogues in the framework (within the framework of a systematic prototyping method) is proposed, which allows taking into account essential information from patent formulas.

В соответствии с [1] в ходе научных исследований необходимо провести литературно-аналитический обзор, на основании которого должны быть найдены аналоги и выбран прототип (представленный одним из аналогов, либо компилятивный). Для этого, в свою очередь, нужно оценить найденные аналоги и сопоставить решенные в них задачи с целями исследователя. При этом имеет смысл рассматривать аналоги, описанные в патентах. Это связано с явным указанием задач в формуле изобретения, и возможности их решения с помощью ранее имеющихся предложений (по слову «отличающийся» в формуле).

Известны способы оценивания как патентов [2,3], так и аналогов общего вида [1,3]. Однако в соответствии с [2,3] способы оценивания патентов учитывают формулу изобретения, но предназначены прежде всего для расчета стоимости патентных решений, а не для прототипирования. Способы оценивания аналогов общего вида, наоборот, могут быть использованы при прототипировании, но при этом игнорируют существенную информацию из патентной формулы [3].

Нами предложен способ оценивания аналогов с патентным описанием, учитывающий формулу из патента и допускающий использование при прототипировании (рисунок 1).

1. Гольдштейн С.Л. Системный метод прототипирования / С.Л. Гольдштейн, С.С. Печеркин // Вестник РАЕН, №1, 2010, с. 45-49.
2. Оценка патентов [Электронный ресурс]. – URL: https://www.interexpertiza.ru/nashi-uslugi/uslugi-po-otsenke/otsenka-nematerialnykh-aktivov/otsenka-patentov/ (дата обращения: 15.01.2023).
3. Оценка стоимости патента [Электронный ресурс]. – URL: https://www.vko-intellekt.ru/services/ocenka-patenta/ (дата обращения: 15.01.2023).

АНАЛИЗ МЕТОДОВ ВЫЧИСЛЕНИЯ СОПРОТИВЛЕНИЯ ПЕРФОРИРОВАННОЙ ПОВЕРХНОСТИ ПАРОГЕНЕРАТОРОВ

Бессонов И. А.[1], Ревякина П. А.[1], Ташлыков О. Л.[1], Лезов А.Д.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Российская Федерация
E-mail: p.revyakina@internet.ru

ANALYSIS OF METHODS FOR CALCULATING THE RESISTANCE OF A PERFORATED SURFACE

Bessonov I. A.[1], Revyakina P. A.[1], Tashlykov O. L.[1], Lezov A. D.[1]
[1)] Ural Federal University named after the First President of Russia B. N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russian Federation

A theoretical assessment of the resistance of the perforated surface is carried out. Modeling of the hydrodynamics of flow through a perforated surface in the computational fluid dynamics package SolidWorks Flow Simulation at different levels of the computational grid is presented.

Компьютерное моделирование, позволяющее рассмотреть физические процессы без применения опытно-практического метода, является одним из основных инструментов научного исследования сложных объектов. На атомных электростанциях (АЭС) применяется конструкционно сложное оборудование, содержащее в себе детали, которые имеют в своей структуре множество отверстий различных диаметров. Примером может служить подвесной дырчатый лист (ПДЛ) в парогенераторах ПГВ-1000МКП. Особенность моделирования движения пара через ПДЛ заключается в том, что диаметр отверстий на несколько порядков меньше, чем габаритный размер самого ПДЛ.

Целью работы является анализ различных подходов в моделировании движения потока пара через ПДЛ в пакете вычислительной гидродинамики SolidWorks Flow Simulation. Сравнение полученных результатов моделирования с теоретическим расчетом позволит найти наиболее оптимальное соотношение времени расчета к точности результата.

При внезапном сужении канала гидродинамические потери возникают при расширении струи, сжатой после выхода из широкого канала в узкий. Коэффициент местного сопротивления может быть определен по следующей зависимости:

$\zeta_м=(\Delta p_м \cdot 2)/(\rho \cdot u_0^2)=0{,}5(1-F_0/F_1)^(3/4)$,

где $\Delta p_м$ – местное сопротивление, ρ – плотность текучей среды, u – скорость потока, F_0 – площадь проходного сечения после сужения канала,

F_1 – площадь проходного сечения до сужения [1].

ПДЛ разделен на сегменты с различным диаметром прохода от 8 мм до 13 мм (для парогенератора реакторной установки ВВЭР-ТОИ). Количество отверстий составляет 14300.

В работе рассмотрено моделирование динамики потока с использованием следующих методов: использование глобальной сетки, применяемой на всю модель; использование локальной сетки, которая устанавливается только на зону расположения отверстий, вся остальная область моделируется в глобальной сетке; моделирование ПДЛ с использованием модели пористого тела.

В программном комплексе Flow Simulation пористая среда моделируется как распределенное по объему сопротивление течению [2]. Для создания корректной модели нужно задать пористость – объемную долю пор в общем объеме среды и коэффициент гидродинамического сопротивления

$k = –grad(P) / (\rho \cdot u)$,

где P – давление в жидкости, ρ – плотность текучей среды, а u – скорость потока. Этот коэффициент задается в виде табличной зависимости от параметров течения (перепада давления на единицу, скорости, линейных размеров, размера поры или др.).

В программном комплексе SolidWorks построена твердотельная модель перфорированной поверхности. Проведен ряд вычислительных экспериментов с целью выявления оптимального метода моделирования.

Методом математического расчета было получено значение гидродинамического сопротивления. На основании результатов было сделано заключение о том, какой из методов обладает наилучшим выбранными показателями.

1. Справочник по гидравлическим сопротивлениям/Под ред. М. О. Штейнберга.- 3-е изд., перера б. и доп.- М.: Машиностроение, 199Z.-672 с.: ил.
2. Программный пакет COMSOL Multiphysics – проектирование, прогнозирование // Сайт «COMSOL Multiphysics» [Электронный ресурс]: Режим доступа: https://www.comsol.ru/comsol-multiphysics (дата обращения: 22.02.2023)

ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕМАТИКИ СТЕНКИ ЛЕВОГО ЖЕЛУДОЧКА В ТЕЧЕНИЕ СЕРДЕЧНОГО ЦИКЛА В НОРМЕ И ПРИ ПАТОЛОГИИ МЕТОДАМИ СТАТИСТИЧЕСКОГО АНАЛИЗА ФОРМЫ

Рокеах Р.О.[1, 2], Чумарная Т.В.[1, 2], Зубарев С.В.[2, 3], Соловьёва О.Э.[1, 2]
[1)] Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия
[2)] Институт иммунологии и физиологии УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[3)] Национальный медицинский исследовательский центр им. В.А. Алмазова, Санкт-Петербург, Россия
E-mail: roman.rokeakh@yandex.ru

LEFT VENTRICULAR MOTION STUDY WITH STATISTICAL SHAPE ANALYSIS

Rokeakh R.O.[1, 2], Chumarnaya T.V.[1, 2], Zubarev S.V.[2, 3], Solovyova O.E.[1, 2]
[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia B. N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia
[2)] Institute of Immunology and Physiology of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia
[3)] Almazov National Medical Research Centre, Saint-Petersburg, Russia

Left ventricular motion was assessed in echocardiographic records of chronic heart failure patients and healthy volunteers using statistical shape analysis. Features were extracted in unsupervised manner that describe aspects of left ventricular shape and motion and characterize pathological heart

Введение. Множеством работ подтверждено, что оценка деформации и изменения формы левого желудочка (ЛЖ) сердца человека в течение сократительного цикла, является необходимым этапом при диагностики патологии систолической и диастолической функции сердца. В ультразвуковой диагностике используются показатели (такие как фракция выброса, индекс сферичности, деформация, скорость деформации) [1], полученные в определённые фазы сердечного цикла и/или в определённых регионах ЛЖ, не учитывающие всю информацию о контуре в течение сердечного цикла. В связи с этим интерес представляют машинные методы анализа данных. В недавнее время распространение получил подход статистического анализа формы [2]. Мы опробовали его на наших данных и проанализировали результаты.

Цель. Оценить особенности кинематики стенок ЛЖ в сердечном цикле в норме и при ХСН методами статистического анализа формы.

Методы. Анализировались ЭхоКГ изображения, полученные в В-режиме в течение полного сердечного цикла у добровольцев без сердечно-сосудистой патологии (n=34) и у пациентов с хронической сердечной недостаточностью (ХСН, n=30 до имплантации устройства сердечно-ресинхронизирующей терапии, n=23 после имплантации). Контуры ЛЖ на эхокардиографических

изображениях в течение сердечного цикла сегментированы полуавтоматически методом оптического потока [3]. Отдельный контур представлялся 49 точками на плоскости. Методами статистического анализа формы [4] построены пространства shape space (SS) - описывающее различия формы ЛЖ (shape space, SS), и trajectory space (TS) - пространство сердечных циклов. Количественными и визуальными методами исследованы полученные пространства. Проведено сравнение значений компонент SS и TS между группами контроля и ХСН.

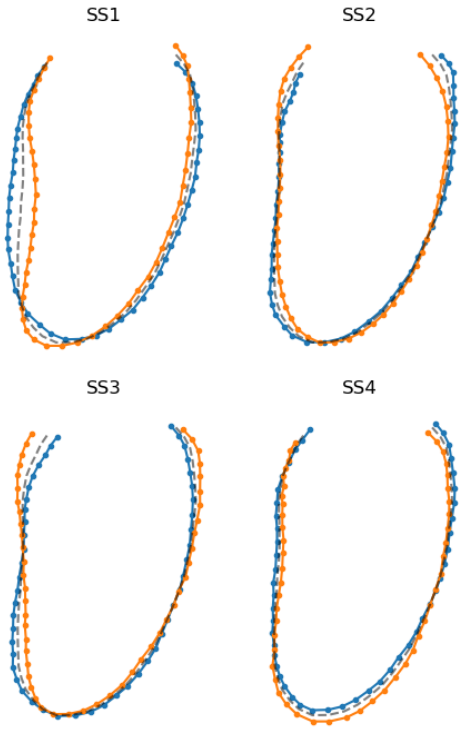


Рис. 1. Визуализация первых четырех компонент пространства форм SS (первые 4 компоненты описывают 68% всей изменчивости формы ЛЖ). Серой прерывистой линией обозначена средняя форма в выборке. Синим цветом указан минимум по соответствующей компоненте, оранжевым максимум

Результаты. Первая компонента SS1 описывает 30% общей дисперсии формы из всего набора данных, больший вклад в эту компоненту вносят точки межжелудочковой перегородки (МЖП) и свободной стенки ЛЖ. Больший вклад в компоненту SS2 (22% дисперсии) вносят точки верхушечной области и базальные отделы МЖП и свободной стенки. Деформация формы в SS3 (8%) связана с движением межжелудочковой перегородки ЛЖ, а SS4 (8%) связана с деформацией ЛЖ по длинной оси.

Первая компонента TS1 (объясняет 19% общей дисперсии траекторий стенки ЛЖ) больше всего зависит от систолической функции ЛЖ, в то время как TS2 (13% дисперсии) и TS3 (8%) описываются фазами расслабления и быстрого наполнения диастолы.

При сравнении значений компонент SS и TS между группами контроля и ХСН найдены значимые различия по первой, второй и четвертой компонентам пространства SS, по всем компонентам TS.

Заключение. Получено новое представление о кинематике стенки ЛЖ в течение сердечного цикла, учитывающее всю временную изменчивость формы ЛЖ в цикле. Выделены компоненты пространства SS и TS значимо отличающиеся в группе контроль и ХСН.

Работа поддержана грантом РНФ № 19-14-00134

1. Armstrong W and Ryan T, Feigenbaum's Echocardiography, Lippincott Williams & Wilkins (2012)
2. Suinesiaputra A et al., IEEE J Biomed Health Inform., 22(2), 503-515 (2018)
3. Zyuzin V et al., 2020 Ural Symposium on Biomedical Engineering, Radioelectronics and Information Technology (USBEREIT), 499-502 (2020)
4. Piras P et al., Sci Rep., 7(1), 12259 (2017)

СИСТЕМА ОПТИМАЛЬНОГО УПРАВЛЕНИЯ РЕЖИМАМИ РАБОТЫ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СЕТЕЙ СРЕДНЕГО НАПРЯЖЕНИЯ

Рохлов В.А.[1]
[1)] Тюменский индустриальный университет, г. Тюмень, Российская Федерация
E-mail: rohlov.vlad.97@mail.ru

SYSTEM OF OPTIMAL CONTROL OF MEDIUM VOLTAGE ELECTRIC NETWORKS OPERATION MODES

Rokhlov V.A.[1]
[1)] Tyumen Industrial University, Tyumen, Russian Federation

The work describes the principle of operation and construction of an optimal control system for the operation modes of medium-voltage electric networks based on reclosers. To form control actions, a mathematical model has been developed, which is a linear optimization problem.

Одним из важнейших показателей эффективности передачи электроэнергии является уровень потерь. По статистике, наибольшие потери электроэнергии наблюдаются в распределительной сети 10/0,4 кВ. Реализация мероприятий по снижению потерь приведет к снижению затрат на их оплату со стороны электросетевых организаций, а также к снижению тарифа на электроэнергию. Таким образом, задача снижения потерь электроэнергии при ее транспорте по распределительным сетям в настоящее время остается актуальной.

Распределительные электрические сети имеют сложную структуру из-за постепенности их развития, что позволяет управлять режимами работы сети изменяя ее топологию посредством оперативных переключений. С течением времени нагрузка на сеть меняется ввиду переменности графиков нагрузок существующих потребителей и присоединения новых, следовательно, оптимальные, с точки зрения потерь, режимы работы не являются постоянными. Поэтому, разработка системы оптимального управления режимами работы распределительных электрических сетей в реальном времени является путем к снижению уровня потерь электроэнергии.

В настоящее время с целью автоматизации и повышения надежности электроснабжения, в электрических сетях среднего напряжения (6-10 кВ) широкое распространение получили реклоузеры.

Реклоузер состоит из двух основных компонентов: коммутационный модуль (вакуумный выключатель) и шкаф управления. Шкаф управления состоит из Wi-fi антенны, аккумуляторной батареи, модуля управления и устройства передачи данных. Модуль управления предназначен, в том числе, для управления коммутационным модулем. Таким образом, функционал реклоузеров позволяет

использовать их в качестве инструмента для централизованного управления электрической сетью.

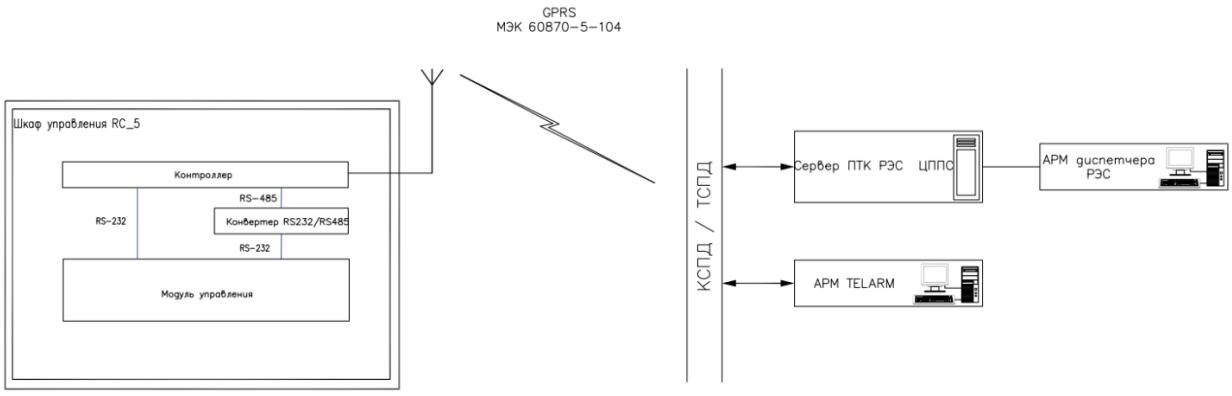


Рис. 1. Схема организации передачи данных

Для передачи управляющих воздействий в данной работе предлагается использование интерфейса SCADA ввиду объемного функционала и возможности объединения реклоузеров и других элементов электрической сети, а так же измерительных приборов в единую систему. Схема организации передачи данных показана на рисунке.

Для формирования управляющих воздействий разработана математическая модель, которая представляет собой линейную оптимизационную задачу, содержащую целевую функцию и систему ограничений. Целевая функция задает зависимость потерь мощности в линиях электропередачи от положений нормальных разрывов сети, коммутируемых реклоузерами. Ограничения накладываются на загрузку центров питания. Решением задачи является вектор, координаты которого задают положения реклоузеров, соответствующие оптимальному режиму работы сети. Решение производится с применением методов дискретного программирования, таких как симплекс-метод и метод ветвей и границ [1].

Применение описанной системы в эксплуатации электросетевого комплекса позволит снизить уровень потерь и повысить адаптивность сетей к внешним условиям. На расчетной модели снижение потерь мощности принимает разные значение, в зависимости от начальной схемы сети. В среднем, снижение потерь составило 24,85%.

1. Корбут А. А. Дискретное программирование / А. А. Корбут, Ю. Ю. Финкельштейн. – Москва : Наука, 1969. – 368 с. – Текст : непосредственный;

ОБ АНАЛИЗЕ ПАТЕНТОВ НА СПОСОБЫ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ И ДИАГНОСТИКИ ИНФЕКЦИИ В ХИРУРГИИ

Гольдштейн С.Л.[1], Кудрявцев А.Г.[1], Рыбина Е.А.[1]
[1)] ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет», физико-технологический институт, кафедра технической техники, Екатеринбург, РФ
E-mail: fieryglow@rambler.ru

ON THE ANALYSIS OF PATENTS ON METHODS FOR PREDICTING AND DIAGNOSING INFECTION IN SURGERY

Goldstein S.L.[1], Kudryavtsev A.G.[1], Rybina E.A.[1]
[1)] Federal State Autonomous Educational Institution of Higher Education «Ural Federal University», Institute of Physics and Technology, Department of Technical Physics, Ekaterinburg, RF

In the work, the problem of algorithmization of patent descriptions for methods for predicting and diagnosing SSI was posed and solved, with an assessment of the development of this field of medicine, taking into account the specifics of cardiac surgery, in order to reach the best compilation protot

В ходе патентного поиска о способах прогнозирования и диагностики инфекции области в хирургии сопоставлены аналоги и по лучшим ([1], [2], [3], [4]) выбран компилятивный прототип о способах прогнозирования и диагностики инфекции области хирургического вмешательства.

Главными критериями отбора аналогов были: принадлежность к области медицины, а именно к хирургии, и наличие прогнозирования и/или диагностики послеоперационных осложнений. В процессе выполнен первичный анализ – выход на значимые элементы изобретений с целью их интеграции и последующей критики. Для оценивания аналогов также были использованы критерии качества алгоритмов, полученных путем анализа семантики при переходе от вербальных описаний применяемых процедур и решений в патентах к более строгим графическим, например, к языку блок-схем по ГОСТ 19.701.

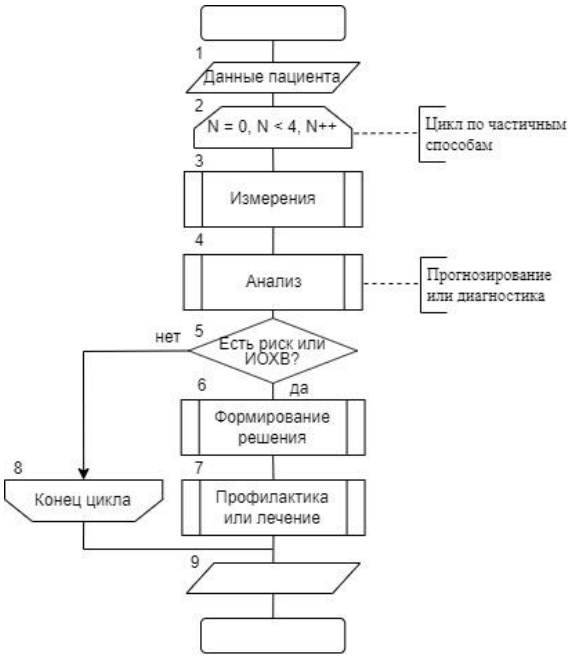


Рис. 1. Алгоритмическая модель компилятивного прототипа

В результате создана база для дальнейшего развития прототипа с целью повышения эффективности прогнозирования и диагностики инфекций области хирургического вмешательства.

1. Блинова Н.П. Способ диагностики инфекций области хирургического вмешательства после операции, выполненных по поводу острой хирургической патологии: патент на изобретение [Электронный ресурс] / Н. П. Блинова [и др.]. – URL: https://patenton.ru/patent/RU2631413C1
2. Шигехо Э. Method for diagnosing post-operative infection: патент на изобретение [Электронный ресурс] / Э. Шигехо [и др.]. – URL: https://patents.google.com/patent/WO2013024798A1/en
3. Арсютов В.П. Способ прогнозирования развития послеоперационных осложнений: патент на изобретение [Электронный ресурс] / В. П. Арсютов [и др.]. – URL: https://yandex.ru/patents/doc/RU2222014C1_20040120
4. Заболотских И.Б. Способ прогнозирования послеоперационных осложнений: патент на изобретение [Электронный ресурс] / И. Б. Заболотских [и др.]. – URL: https://yandex.ru/patents/doc/RU2149580C1_20000527

ИМИТАЦИОННАЯ ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА ПО ИЗУЧЕНИЮ РАДИАЦИОННО-ЗАЩИТНЫХ СВОЙСТВ МАТЕРИАЛОВ

Самбурских Д.С.[1], Гречишкин Р.О.[1], Аладаилах М.В.[1], Ташлыков О.Л.[1], Климова В.А.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: denis.samburskih@yandex.ru

SIMULATION LABORATORY WORK ON THE STUDY OF RADIATION-PROTECTIVE PROPERTIES OF MATERIALS

Samburskikh D. S.[1], Grechishkin R.O.[1], Aladailakh M.V.[1], Tashlykov O.L.[1], Klimova V.A.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

A simulation laboratory work to determine the multiplicity of attenuation of gamma radiation by samples of radiation-protective materials were presented in this study

Сложности, связанные с обеспечением требований радиационной безопасности при взаимодействии с источниками ионизирующего излучения, зачастую приводят к невозможности выполнения запланированных лабораторных работ в образовательных учреждениях. В связи с этим, в ходе учебного процесса студенты не всегда могут выполнять ряд важных работ или опытов с источниками ионизирующего излучения. Целью является создание имитационной лабораторной работы по изучению радиационно-защитных свойств материалов без использования реальных источников излучения.

Задачей данной имитационной лабораторной работы является ознакомление обучающихся с основными принципами расчета ослабления гамма-излучения при помощи базы данных NIST XCOM [1]. В лабораторной работе источник выбирается из предлагаемого списка с заданием его активности. Следующим этапом является задание параметров защитного материала (толщина, плотность и коэффициент массового ослабления); коэффициент массового ослабления рассчитывается с помощью базы данных NIST XCOM, позволяющей задавать любые составы материалов. Также задается расстояние от источника до детектора. Итогом выполнения работы являются данные о кратности ослабления прямого узкого пучка гамма-излучения заданным образцом.

На данный момент разработка лабораторной работы находится в стадии реализации. Проводятся консультации со специалистами в области радиационно-защитных материалов. Ожидаемым результатом внедрения работы в учебный процесс студентов будет является интерактивное ознакомление студентами с основами разработки радиационно-защитных материалов.

1. Element/Compound/Mixture Selection // NIST URL: https://www.physics.nist.gov/PhysRefData/Xcom/html/xcom1.html (дата обращения: 20.02.2023).

РАЗМЕТКА ВИДЕОДАННЫХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КРАУДСОРСИНГА ДЛЯ ЗАДАЧИ ДЕТЕКТИРОВАНИЯ

Шека А.С.[1]
[1)] Институт математики и механики им. Н. Н. Красовского Уральского отделения Российской академии наук
E-mail: andrey.sheka@gmail.com

LABELING VIDEO DATA USING CROWDSOURCING FOR THE DETECTION TASK

Sheka A.S.[1]
[1)] N.N. Krasovskii Institute of Mathematics and Mechanics of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences

The research developed a video labeling method using a crowdsourcing platform for the detection task. The paper considers various aspects of the labeling task, including decomposition of the labeling task, evaluation and acceptance of the markup results, and time and costs.

Задача детектирования объектов на изображении [1] является одной из самой востребованной прикладной задачей. В решении данной задачи хорошо себя зарекомендовали глубокие нейронные сети [2]. Однако, для качественного обучения нейронных сетей необходима большая обучающая выборка.

В открытом доступе имеются размеченные данные только для ограниченного круга задач, которые не покрывают все прикладные потребности. Поэтому для решения большинства прикладных задач необходимо производить сбор и разметку данных. При этом сбор данных может оказаться значительно менее трудозатратным, чем их разметка. Для разметки данных часто используют краудсорсинговые платформы, которые позволяет привлечь большое количество людей для выполнения рутинных задач за относительно небольшие деньги.

В рамках исследования был разработан метод разметки видео с использованием краудсорсинговой платформы для задачи детектирования квадракоптера. В работе рассмотрены различные аспекты постановки задачи разметки на платформе, включая декомпозицию задачи разметки, оценка и приемка результатов разметки, а также временный и денежный затраты.

Также предложен метод промежуточной интерполяции данных, который позволяет минимизировать затраты на разметку данных при использовании краудсорсинговых платформ и при этом получить приемлемое качество.

По результатам исследования был собран датасет, объем которого сопоставим с объемом датасета используемого для тестирования нейронных сетей, решающих задачу детектирования.

1. Tsung-Yi Lin, Maire, M., Belongie, S. J., Bourdev, L. D., Girshick, R. B., Hays, J., … Zitnick, C. L. (2014). Microsoft COCO: Common Objects in Context. CoRR, abs/1405.0312. Retrieved from http://arxiv.org/abs/1405.0312
2. Redmon, J., Divvala, S., Girshick, R., & Farhadi, A. (2016). You Only Look Once: Unified, Real-Time Object Detection. In 2016 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR) (pp. 779–788). https://doi.org/10.1109/CVPR.2016.91

ИССЛЕДОВАНИЕ НЕПРЕРЫВНОСТИ СТРУКТУРНОЙ СЛОЖНОСТИ НА ПРИМЕРЕ ДВУМЕРНЫХ ИЗОБРАЖЕНИЙ

Соломеин А.В.[1], Кашин И.В.[1]
[1)] Уральский Федеральный университет, Екатеринбург, Россия
E-mail: andrej-solomein@yandex.ru

THE STUDY OF THE CONTINUITY OF STRUCTURAL COMPLEXITY ON THE EXAMPLE OF TWO-DIMENSIONAL IMAGES

Solomein A.V[1], Kashin I.V.[1]
[1)] Уральский Федеральный университет, Екатеринбург, Россия

In this paper we will analyze structural complexity of 2D images and how different transformations of image affects it. The goal of this work is to create method for generating and describing images with set complexity.

В данной работе рассматривается такая характеристика изображений как структурная сложность. Структурная сложность в нашем понимании – это некоторое число, которое ставится в соответствие изображению, само понятие было описано в статье [1]. Любому изображению соответствует лишь одно число, однако разные изображения могут иметь одинаковую сложность.

Целью работы является анализ свойств структурной сложности, подбор способов преобразования изображений для изменения величины структурной сложности на заданную величину, а также разработка метода для описания произвольных изображений с известной структурной сложностью.

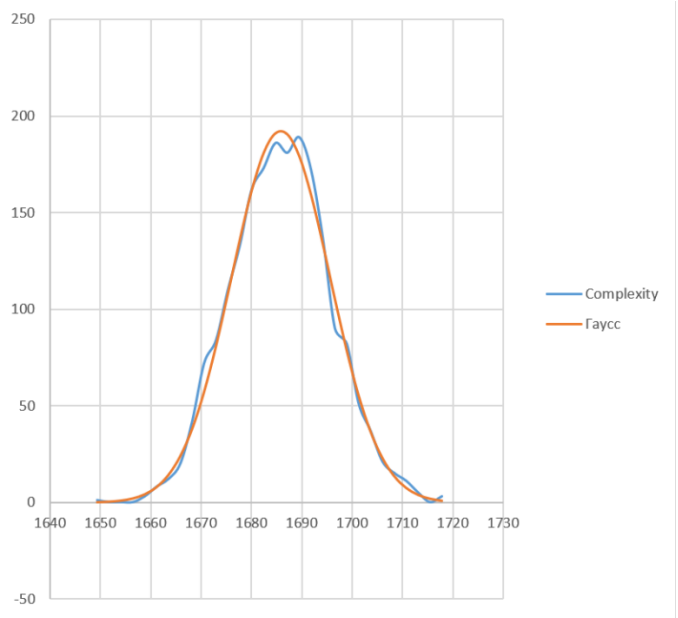


Рис. 1. Полученное распределение структурной сложности для 2000 случайно сгенерированных изображений.

Для анализа свойств структурной сложности были использованы как изображения, где цвет каждого пикселя выбирался случайно (белый шум), так и сгенерированные нейросетью. Распределение структурной сложности для белого шума при увеличении числа изображений стремится к распределению Гаусса (рис. 1). При этом среднее значение и дисперсия пропорциональны квадрату нормы изображений (сумма значений по всем пикселям), и все изображения приводятся к одинаковому её значению. Однако, подобная закономерность не наблюдалась при рассмотрении изображений, сгенерированных нейросетью.

В качестве основного метода для оценки качества некоторого способа преобразования изображения с целью получить желаемое значение структурной сложности был выбран метод PEDD (predetermined equilibrium driven dynamics) [2]. В рамках данного метода мы задаём распределение в виде функции, затем производим преобразования над изображением, каждый раз получая изменённое изображение. Каждое новое изображение даёт нам определённое значение структурной сложности. Мы делаем преобразование таким образом, чтобы получаемое распределение из значений структурной сложности стремилось к заранее заданному, путём сравнения статистического недобора для набора пробных шагов по методу PEDD. Данный подход позволяет нам получить некоторый набор изображений, структурная сложность которых лежит в заданном диапазоне.

1. Bagrov, A. A., Iakovlev, I. A., Iliasov, A. A., Katsnelson, M. I., & Mazurenko, V. V. (2020). Multiscale structural complexity of natural patterns. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 117(48), 30241-30251
2. I. V. Kashin, AIP Conf. Proc. 2313, 030048 (2020) Predetermined equilibrium driven dynamics

ОЦЕНКА ЭФФЕКТИВНОСТИ ЛЕДОВОГО КОНДЕНСАТОРА В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ЕГО ГЕОМЕТРИЧЕСКОЙ КОНФИГУРАЦИИ

Та Ван Тхыонг[1], Бессонов И.А.[1], Бреусова А.А.[1], Ревякина П.А.[1], Чалпанов С.В.[1], Ташлыков О.Л.[1]
[1)] Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина
E-mail: vantkhyong.ta@urfu.me

EVALUATION OF ICE CONDENSER EFFICIENCY DEPENDING ON ITS GEOMETRIC CONFIGURATION

Ta Van Thuong[1], Bessonov I.A.[1], Breusova A.A.[1], Revyakina P.A.[1], Chalpanov S.V.[1], Tashlykov O.L.[1]
[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin

In this paper, we studied the influence of geometric characteristics of an ice condenser, modeled in the COMSOL Multiphysics computational package, on the heat flux intensity. The calculation of the necessary refrigeration unit to maintain the ice condenser in the state of readiness was carried out.

Одним из вариантов аварийного охлаждения и снижения давления внутри герметичной оболочки реакторного выделения являются ледовые конденсаторы, преимуществом которых является высокая аккумулирующая способность, ввиду высокого значения удельной теплоты плавления льда [1].

Основным процессом, обеспечивающим охлаждение рабочего тела в ледовом конденсаторе, является плавление льда. Для оценки эффективности использования ледовых конденсаторов был использован вычислительный пакет COMSOL. Multiphysics, позволяющий решать задачи, связанные с фазовыми переходами. Модель представляет из себя объем льда в форме прямоугольного параллелепипеда, в котором расположены трубы с греющей средой.

В результате моделирования была получена зависимость изменения мощности теплового потока от трубы ко льду от времени.

Следующим этапом было исследование влияния геометрических характеристик ледового конденсатора (шаг расположения трубок и их диаметр) на интенсивность теплового потока. Получен вывод о том, что увеличение диаметра приводит к уменьшению времени интенсивного отвода тепла, при этом шаг остается неизменным. Также, увеличение шага приводит к увеличению времени интенсивного отвода тепла. Для трубок диаметром 10 мм, 15 мм, 20 мм время интенсивного отвода тепла стабилизируется при шаге более 70 мм.

Также, с целью определения эффективности каждого варианта проводилась оценка времени до полного плавления льда. В результате получено, что с увеличением шага расположения трубок время до полного плавления увеличивается, но при увеличении трубок снижается. Это объясняется

увеличением площади контакта трубы и ледового объема, а также снижением массы льда в ячейки в случае увеличении диаметра.

В процессе изучения эффективности работы ледовых конденсаторов рассмотрено влияние шахматного расположения трубок внутри ледового объёма на время интенсивного отвода тепла. Из результатов моделирования следует, что при установке отводящих труб в шахматный пучок время интенсивного теплоотвода снижается примерно 10%. Это объясняется тем, что плотность расположения трубок повышается, ледовый объем снижается.

До момента срабатывания системы пассивного отвода тепла ледяной объем находится при температуре -10° С. С целью снижения тепловых потерь предлагается использование теплоизоляционного материала из базальтового волокна. Толщина тепловой изоляции составляет 100 мм.

Для поддержания в состоянии готовности ледового конденсатора, способного отводить тепло с интенсивностью 180 кВт, необходима холодильная установка с мощность компрессора 70 Вт.

Разработанная модель войдет в основу цикла работ, направленные на исследования применимости ледовых конденсаторов, в качестве систем пассивного отвода теплоты от реакторных установок различной мощности.

1. Hylko J.M. Maintaining Nuclear Plant Ice Condensers: A ‘Cool’ Responsibility / Hylko J.M. [Электронный ресурс] // Power : [сайт]. — URL: https://www.powermag.com/maintaining-nuclear-plant-ice-condensers-a-cool-responsibility/ (дата обращения: 24.02.2022)

АНАЛИЗ ДЛИН СЛОВ В ТЕКСТАХ ПУБЛИЧНЫХ ВЫСТУПЛЕНИЙ

Цижмовска Н.Л.[1], Мартюшев Л.М.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: nata-cizmov@yandex.ru

ANALYSIS OF WORD LENGTHS IN TEXTS OF PUBLIC SPEECHES

Tsizhmovska N.L.[1], Martyushev L.M.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

An analysis of the word lengths of public speeches has been studied. The average word lengths for the two periods 1800 to 1900 and 1900 to 2021 are different. The distribution of word lengths is most likely to follow a lognormal distribution.

Существует множество подходов по изучению длины слова. Так, например, в [1] отмечается, что длина слова часто монотонно увеличивается от начала к концу предложения, а распределение длин слов соответствуют распределению Пуассона. В работе [2] предлагают использовать для этого функцию Ципфа-Алексеева и отмечается, что существует связь между длиной слова и средней частотой слова. В работе Бочкаревой В.В. указывается, что средняя длина слова немного увеличилась в 19 веке, затем она быстро росла большую часть 20-го века и начала уменьшаться в период с конца 20-го по начало 21-го века.

Отметим, что каждое новое исследование становится уникальным и нередко противоречащим по отношению к предыдущим. Цель нашего исследования – определить, как именно изменяется со временем длина слова и изменяется ли, и какой закон описывает распределение длин слов.

В данном исследовании были проанализированы речи президентов США (59 инаугурационных [3], а также 30 речей перед конгрессом [4]). Дополнительно анализировались 221 речь лидеров партий Великобритании и 26 их выступлений в палате лордов [5].

Результат нашего исследования, показывает, что длина слова как для речей Великобритании, так и для речей США в период с 1900 по 2021 достоверно не изменяется. Для США средняя длина слова составляет 4.6, для Великобритании – 4.5. При этом отметим, что для временного отрезка с 1800 по 1900 средняя длина слова в речах президентов США немного больше и равна 4.9, что отличается от аналогичного периода для Великобритании, где длина слова составляет 4.6.

Исследование показало, что распределение длин слов с наибольшей вероятностью подчиняется логнормальному распределению в сравнении с распределениями Вейбулла, Релея, нормальным, полунормальным и Folded normal. Параметр распределения логнормального распределения мю со временем

не изменяется и для обеих выборок колеблется от 1.1 до 1.3. Второй же параметр распределения сигма со временем уменьшается, причем, если до 1925 значения находились в пределах от 0.6 до 0.8, то для периода времени с 1925 по 2021 значение постепенно уменьшается и находятся в пределах от 0.6 до 0.7.

1. Popescu I. I. et al. Word length: aspects and languages // Issues in quantitative linguistics. – 2013. – Т. 3. – С. 224-281.
2. Chen H., Liu H. A diachronic study of Chinese word length distribution //Glottometrics. – 2014. – Т. 29. – С. 81-94.
3. Inaugural Addresses of the Presidents of the United States. Available online: https://www.bartleby.com/124/ (дата обращения: июль 2021)
4. Miller center. Presidential Speeches. Available online: https://millercenter.org/the-presidency/presidential-speeches (дата обращения: октябрь 2022)
5. UK Parliament. Available online: https://hansard.parliament.uk/ (дата обращения: сентябрь 2022)

ОПТИМИЗАЦИЯ ПРОЦЕССА ЗАМЕНЫ МОДУЛЕЙ ПАРОГЕНЕРАТОРА ПГН-200М ПРИ ПОМОЩИ 3D-МОДЕЛИРОВАНИЯ

Завадский Д. И.[1, 2], Ташлыков О. Л.[1]
[1)] Уральский Федеральный Университет
[2)] Белоярская АЭС
E-mail: danilezavadsky@gmail.com

OPTIMIZATION OF THE PGN-200M STEAM GENERATOR MODULES REPLACEMENT PROCESS USING 3D MODELING

Zavadskii D. I.[1, 2], Tashlykov O. L.[1]
[1)] Ural Federal University
[2)] The Beloyarsk NPP

In the presented work considered a complete overhaul of 2022. To optimize the process of steam generator modules replacement was made a decision to develop a digital 3D model of PGN-200M steam generator, indicating the sequence of operations and location of all equipment units.

Продление срока эксплуатации (ПСЭ) действующих энергоблоков АЭС является одной из важных тенденций современного этапа развития атомной энергетики и наиболее эффективным направлением вложения финансовых средств, для сохранения генерирующих мощностей. [1].

В представленной работе рассматривается капитальный ремонт 2022 года (КР-2022) на энергоблоке с реакторной установкой БН-600, в течение которого производилась замена 8 испарительных модулей и 1 пароперегревательного модуля одного из парогенераторов ПГН-200М. В ходе работ возникали задержки, связанные с несовершенством технической документации, а также отсутствием обучающих материалов, ввиду уникальности выполняемых работ. Поэтому, принято решение о разработке цифровой 3D-модели ПГН-200М, с указанием последовательности выполнения операций и расположением всех единиц оборудования. Для оптимизации процесса замены модулей ПГ все технологические процессы были сгруппированы в укрупненные этапы (приёмка новых модулей и входной контроль; подготовка их к монтажу; демонтаж существующих модулей из бокса парогенератора; монтаж новых модулей и т.д.).

Указанные операции, в течение КР-2022, выполнялись максимально быстро, но ввиду несовершенства некоторых технологических процессов, было потеряно около 48 часов. Соответственно, потери годовой выработки составили около 29 500 тыс. кВтч.

Основные проблемы были связаны с выполнением операций по монтажу и демонтажу оборудования, а также выполнением эксплуатационного контроля металла (ЭКМ) натриевых трубопроводов II-го контура. Следовательно,

реализуемая 3D-модель ПГН-200М должна отражать не только трассировку оборудования и трубопроводов и последовательность операций, а также содержать расположение сварных швов, для более эффективного выполнения ЭКМ трубопроводов (см. рис.1).

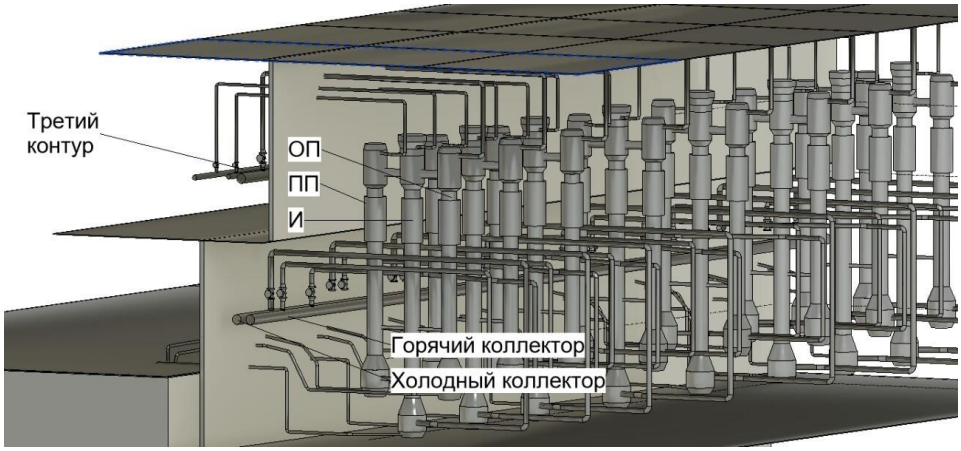


Рис. 1. 3D-модель ПГН-200М в боксе парогенератора.

Виртуальная модель атомной станции позволит сократить время строительства и позволить эффективно проводить работы по ремонту, демонтажу и монтажу оборудования [2], [3].

Процесс создания 3D-модели основывается на результатах экспериментов, проведенных в течение капитального ремонта 2021 года [4]. В данный момент ведутся активные работы по реализации виртуальной модели. Её готовность составляет около 50%, работы планируется завершить к июлю 2023 года. Планируемое сокращение времени ремонта при использовании "цифрового двойника" парогенератора ПГН-200М на энергоблоке с реактором БН-600 составит примерно 10%, это около 72 часов дополнительной выработки электроэнергии.

Актуальность активного внедрения виртуальных технологий в процесс оптимизации работ на АЭС определяется необходимостью сокращения сроков ремонта, путём качественной проработки технологических процессов и операций [5]. Важно сохранить качество выполнения работ, но при этом уменьшить их продолжительность.

1. Камчатова Е.Ю. Инновационный потенциал атомной энергетики. // Вестник Университета. 2017. С. 40-47.
2. Завадский Д.И., Ташлыков О.Л. Использование 3D-моделирования при оптимизации радиационной защиты персонала / Инновации в атомной энергетике: [Электронный ресурс]: сб. докладов конференции молодых специалистов (23–24 октября 2019 г., Москва). – М.: Изд-во АО «НИКИЭТ», 2019. С.844-850.

3. Завадский Д.И., Ташлыков О.Л. «Использование BIM-проектирования при планировании радиационно-опасных работ» / Ядерные технологии: от исследований к внедрению – 2019: Сборник материалов научно-практической конференции. Нижний Новгород, 2019. С. 44-45.
4. Завадский Д.И., Ташлыков О.Л. «Роль виртуальных технологий в оптимизации радиационной защиты персонала (на примере АЭС с РУ БН-600)» / Конференция «Будущее Атомной энергетики – AtomFuture 2021», тезисы докладов XVII Международной научно-практической конференции. Обнинск, 22–23 ноября 2021 года. Издательство: Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ" (Москва), 2021. С.192-194.
5. Zavadskii D. I., and Tashlykov O. L. Optimization of radiation protection of staff using BIM-designing AIP Conference Proceedings 2313, 070017 (2020);

СЕКЦИЯ 7

БИОИНЖЕНЕРИЯ И БИОТЕХНОЛОГИИ

ПОЛУЧЕНИЕ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СЫРОВ С ИНКАПСУЛИРОВАННЫМ РЕСВЕРАТРОЛОМ И РЕСВЕРАТРОЛОМ В ТРАДИЦИОННОЙ ФОРМЕ

Аккузина Е.П.[1], Камель М.М.[1], Ковалева Е. Г.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина
E-mail: akkuzinazhenya@yandex.ru

PREPARATION OF FUNCTIONAL CHEESES WITH ENCAPSULATED RESVERATROL AND RESVERATROL IN THE TRADITIONAL FORM

Akkuzina E.P.[1], Kamel M.M.[1], Kovaleva E. G.[1]
[1)] Ural Federal University named after the First President of Russia B.N. Yeltsin

In this study, three rennet cheeses such as control (without resveratrol), with free (powdered) and with encapsulated resveratrol, have been produced. A comparative analysis of the cheeses produced was carried out with respect to organoleptic characteristics (taste, consistency, smell, color). Mass

В последние десятилетия ввиду роста числа хронических заболеваний и установления их причинной связи с несбалансированным питанием к пищевым продуктам стали относиться и как к эффективному средству поддержания физического и психического здоровья и снижения риска возникновения многих заболеваний. Сыр — это продукт, который имеет множество вариантов приготовления в отличие от остальных кисломолочных продуктов. Повышение пищевой и биологической ценности сыров путем добавления различных БАВ в наше время считается актуальной задачей. Ресвератрол - природный полифенол, который демонстрирует плейотропные положительные эффекты [1], включая антиоксидантную, противовоспалительную, кардиозащитную, нейрозащитную и химиопрофилактическую и омолаживающую активность, увеличивая продолжительность жизни [2]. Поэтому использование ресвератрола в производства сыра в качестве одного из ингредиентов придает продукту дополнительные полезные функциональные свойства, включая антиоксидантную активность.

При производстве сыра использовались закваска – Choozit и сычужный фермент - Microbial Meito Rennet. Добавление ресвератрола проводили двумя способами: в свободном виде и в виде липосом, также был изготовлен образец контрольного сыра без ресвератрола. Ресвератрол в виде липосом (инкапсулированной форме) используется с целью защиты и поддержания стабильности функциональных свойств в течение всего срока хранения получаемого сычужного сыра, дополнительно позволяет обеспечить его

регулируемое высвобождение в процессе биологического усвоения, повышает его биодоступность, а также предотвращает горечь сыра.

Был проведен сравнительный анализ полученных сыров в отношении органолептических характеристик (вкуса, консистенции, запаха, цвета); массовой доли белка, жира и влаги, которые показали близкие значения в сыре с ресвератролом и образце контрольного сыра без ресвератрола, что дополнительно подтвердило близость основных потребительских характеристик этих продуктов. Было определено содержание ресвератрола на 7, 14, 21 и 28-й дни периода созревания сыра, которые показали стабильность ингредиента ресвератрола в виде липосом в сычужном сыре. Антиоксидантная активность сычужного сыра с ресвератролом в инкапсулированном виде была определена спектрофотометрическим методом с ингибированием свободных радикалов дифенилпикрилгидразилом (ДФПГ) в процентах ингибирования на 30-й день созревания. Было найдено, что она более чем в 10 раз оказалось выше антиоксидантной активности контрольного сыра без ресвератрола и составила 36,5 % ингибирования. Наивысшую антиоксидантную активность показал сыр с добавлением ресвератрола в виде липосом.

Данная работа была выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ 20-66-47017.

1. Кароматов, И. Д. Биологически активное вещество растительного происхождения ресвератрол - лечебные свойства (обзор литературы) / И. Д. Кароматов, Р. Р. Баймурадов, М. С. Шодиева // Биология и интегративная медицина. – 2018. – № 3(20). – С. 178–198.
2. Baur, J.A. Therapeutic potential of resveratrol: the in vivo evidence / J.A. Baur, D.A. Sinclair // Nat. Rev. Drug Discov. - 2006. - №5. - P. 493–506.

МАГНИТНЫЕ ФЛОКУЛЯНТЫ НА ОСНОВЕ НАНОЧАСТИЦ Fe_3O_4 И ЦИТРУСОВОГО ПЕКТИНА И АНИОННОГО СОПОЛИМЕРА АКРИЛАМИДА С АКРИЛАТОМ НАТРИЯ

Алексеева А.А.[1], Константинова М.А.[1], Миронкина А.С.[1], Никонорова Д.А.[1]
[1)] Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Казанский национальный исследовательский технологический университет» Казань, Россия
E-mail: gavrilovaanastasia09@yandex.ru

MAGNETIC FLOCCULANTS BASED ON Fe_3O_4 NANOPARTICLES AND CITROUS PECTIN AND ACRYLAMIDE ANIONIC COPOLYMER WITH SODIUM ACRYLATE

Alekseeva A.A.[1], Konstantinova M.A.[1], Mironkina A.S.[1], Nikonorova D.A.[1]
[1)] Federal State Budgetary Educational Institution of Higher Education "Kazan National Research Technological University" Kazan, Russia

Magnetic flocculants, due to the combination of magnetic characteristics and polymers functional groups activity, are perfect applicants for high-efficiency, selective polyfunctional nanostructuring applicable in the separation and concentration processes of biological dispersed systems.

Наночастицы оксида железа (Fe_3O_4) благодаря своим размерам, контролируемой намагниченности, химической стабильности, функциализации биоматериалами могут быть интегрированы в клинические препараты и устройства. Эффективность разделения биосистемы может быть повышена при использовании флокулянтов на основе магнетита и полимерных материалов, сочетающих магнитные свойства и высокую сорбционную способность. Задачей настоящей работы являлось получение новых высокоэффективных магнитных флокулянтов, содержащих наночастицы магнетита и цитрусового пектина и анионного сополимера акриламида с акрилатом натрия и оценка их флокулирующих свойств на суспензии диоксида титана в отсутствие и при наложении внешнего магнитного поля.

В работе были синтезированы магнитные флокулянты (МФ) на основе наночастиц Fe_3O_4 и цитрусового пектина (β = 10 мол.%, M = $0{,}023 \cdot 10^6$) и анионного сополимера акриламида с акрилатом натрия (β = 13,5 мол.%, M = $13{,}5 \cdot 10^6$). Частицы магнетита Fe_3O_4 были получены методом соосаждения солей двух- и трехвалентного железа в щелочной среде (NH_4OH) при pH = 9,3–9,5 по методике [1]. В ходе синтеза было выделено 2 образца магнетита: образец 1 центрифугировали при 3000 об/мин в течение 10 мин, образец 2 подвергали ультразвуковой обработке в течение 10 мин. На втором этапе получали МФ путем смешения растворов полимеров с магнитной дисперсией. Средний размер частиц и величину ζ-потенциала поверхности частиц магнетита и МФ определяли

методом динамического рассеяния света. Для подтверждения функциализации поверхности наночастиц магнетита цитрусовым пектином и анионным сополимером акриламида использовались методы ИК-спектроскопии и рентгеноструктурного анализа. Флокулирующую способность МФ оценивали на модельной дисперсной системе – суспензии TiO_2 со средним размером частиц $R_{ср}$ = $1{,}5 \cdot 10^{-6}$ м и ζ-потенциалом (ξ = -11 мВ). Установлено влияние размера наночастиц магнетита, природы и концентрации МФ и локализации магнитного поля на скорость связывания МФ с частицами TiO_2 в дисперсионной среде. Полученные магнитоуправляемые материалы могут быть применены для селективного выделения ценных материалов и разделения биокомпонентов.

1. Проскурина В.Е., Кашина Е.С., Рахматуллина А.П. // Коллоидный журнал. 2023. Т. 84. №1. С. 1-8.

СОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ МОДЕЛИ ПЕРЕМЕННОГО КОЭФФИЦИЕНТА ЖЁСТКОСТИ ДЛЯ АНАЛИЗА ПРОЧНОСТНОГО ПРЕДЕЛА БРОНХИАЛЬНОГО АНАСТОМОЗА

Андреева С.Ю.[1, 2], Соловьева С.Н.[1, 2]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина
[2)] НИЦ АВАНТРЕНД
E-mail: AndreevaSveta.22@yandex.ru

IMPROVEMENT OF THE VARIABLE STIFFNESS COEFFICIENT MODEL FOR STRENGTH LIMIT ANALYSIS OF BRONCHIAL ANASTOMOSIS

Andreeva S.Y.[1, 2], Solovyova S.N.[1, 2]
[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia B.N.Yeltsi
[2)] Scientific research center Avantrend

The dynamics of a deformed bronchial anastomosis leads to a change in the result of the existing variable stiffness coefficient model designed for strength analysis of the bronchial suture. In this connection, it is necessary to determine the parameters of dynamic loads acting on the suture.

В хирургии злокачественных опухолей легкого все чаще применяют резекции с последующей пластикой бронхов. При этом целесообразность выполнения подобных операций определяется в каждом отдельном случае индивидуально и как правило, в качестве основных факторов указывают распространение опухоли по бронху и функциональные показатели пациента.

Однако в общей массе выполняемых операций существует вероятность возникновения несостоятельности бронхиального анастомоза, которая достигает 28% [1].

Стоит отметить, что во время бронхопластики натяжение бронхов проводится вручную, и каждый хирург может по-своему оценивать и реализовывать натяжение анастомозируемых бронхов, упуская фактор возникающей деформации, которая тесно связанна с жесткостью и пределом прочности бронхиального дерева, т. е. изменением взаимного положения внутрилегочных бронхов, связанного с их перемещением, друг относительно друга за счет приложенных усилий, при которых бронхиальное дерево искажает свои формы и размеры, рисунок 1.1. На рисунке 1.2 участки первой и второй отсеченных частей бронхиального дерева соединяют, соответственно изменяется длина бронхов l, параллельно с этим происходит растяжение с напряжением σ и возникает равновесная сила $\sum P = 0$, под действием внешних нагрузок. Однако, если напряжение достигнет определенного предела, называемого пределом упругости, зависимость между нагрузками и перемещениями перестает быть

однозначной; перемещения, соответствующие данной системе нагрузок, зависят от порядка их приложения. После снятия нагрузки вызванные ею деформации не исчезают, а частично сохраняются.

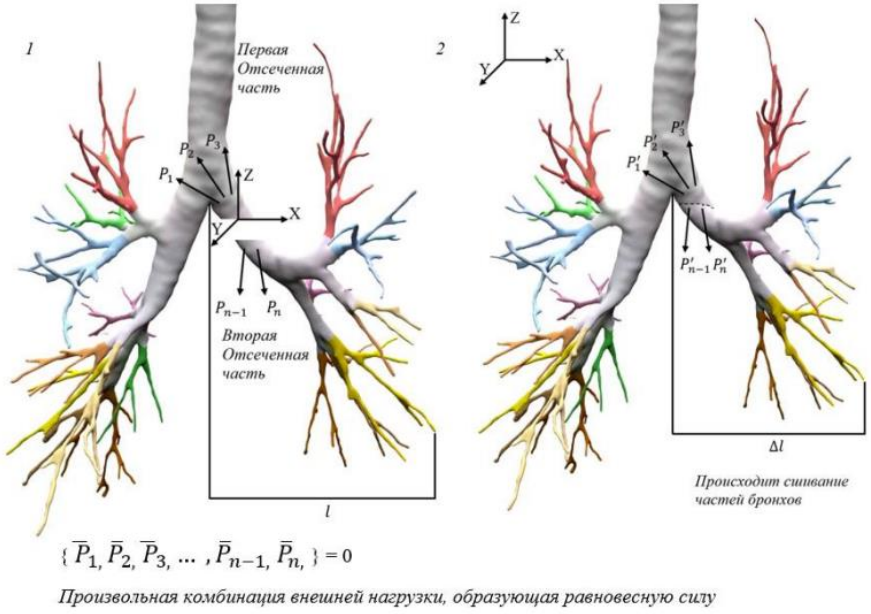


Рис. 1. Бронхиальное дерево с учетом внутренних усилий и их распределением по сечению: 1) до наложения анастомоза; 2) после наложения анастомоза с учетом изменения размеров бронхиального дерева.

В связи с отсутствием общей модели, для описания эффектов, возникающих в результате деформаций, связанных с изменениями некоторых частей бронхиального дерева ранее уже была разработана модель переменного коэффициента жесткости бронхиального дерева, учитывающая предел прочности бронхиального анастомоза, на основании анализа напряженно-деформированного состояния бронха, с учетом внешних силовых факторов [2]. Однако ее биофизические параметры требуют более точного определения. В частности, динамика деформированного бронхиального анастомоза под действием внутренних сил, а именно нагрузки, возникающей в результате натяжения соединенных концов бронхиального анастомоза, нагрузки под влиянием дыхания человека и краткосрочных пиковых нагрузках подобных кашлю.

Другими словами, необходимо выявить силовые воздействия частей бронхиального дерева, т. е. динамические параметры, связанные с упругими напряжениями, которые с учетом интенсивности внутренних сил стремятся деформировать элементы бронха, а именно отделять их один от другого.

Таким образом, учет выявленных параметров позволит усовершенствовать модель переменного коэффициента жёсткости для анализа прочностного предела бронхиального анастомоза, тем что позволит описать эффекты, возникающие в

результате динамических нагрузок, связанных с изменениями некоторых частей бронхиального дерева посредством хирургических вмешательств.

1. Печетов А.А., Грицюта А.Ю., Осложнения после анатомических резекций легких. Современное состояние проблемы (обзор литературы). Поволжский онкологический вестник. 2017; (31) 4: 90-98.
2. Андреева С. Ю. Разработка модели переменного коэффициента жесткости для анализа прочностного предела бронхиального анастомоза //14.03. 02 Ядерные физика и технологии. – 2023.

MONOCLONAL ANTIBODIES: DEVELOPMENT PROSPECTS

Anosike G. C.[1], Ivantsova M.N.[1]
[1)] Institute of Chemical Engineering, Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia
E-mail: anosglo@gmail.com

The use of antibodies in immunohistochemistry and therapeutics is an important tool in science. Monoclonal antibodies are used due to their characteristic high epitope specificity and sensitivity, target identification at the protein level, and localization at the cellular and subcellular scale.

The immune system made up of complex networks of cells, chemicals, tissues and organs defends the body from invading pathogens. An underactive immune system can lead to many illness while an overactive immune system can lead to disorders and autoimmune diseases. Antibodies produced by the immune system to fight the invading pathogens, are made up of immunoglobulins which are glycoproteins produced by the B-cells [2, 3]. Antibodies are grouped into monoclonal and polyclonal antibodies based on their origin from lymphocytes and on their antigen binding site. Polyclonal antibodies interacts with multiple epitope on the same antigen while monoclonal antibody are monospecific in nature targeting a single epitope on an antigen [1].

Monoclonal antibodies (mAbs) represents the most important biopharmaceutical products as full length mammalian cells glycosylated antibodies which allow human-like N-glycosylation are used in its production [5]. Monoclonal antibodies are used to detect, purify and also characterize any substance of interest [3].Use of monoclonal antibodies in treatment is a major advance in the management of inflammatory diseases and have been applied in cancer detection and therapy[4]. Mammalian cells are used most often for production of mAbs due to their ability to perform post-translational modifications (PTM), especially human-like N-glycosylation. Their use simplifies subsequent medical applications by eliminating the risk of an immunogenic response in patients due to incompatible N-glycans on the protein [5].

Advances in biotechnological processes such as in expression systems, strain engineering and production processes using microbes have been used in the production of monoclonal antibodies. Much interest and investment have been given to monoclonal antibody development due to the advancements in antibody engineering technologies, novel antigen discovery and in discovering disease pathway [5].

Conclusion: Monoclonal antibodies have been applied as a standard and characterized part in medical and pharmaceutical practice. Although, the first group of monoclonal antibodies produced had some challenges resulting to its withdrawal, however it led to improvement and development of more functional monoclonal antibody used in treatment and diagnosis of different diseases including cancer and autoimmune diseases. The specificity of target of monoclonal antibodies offers less side effects as opposed to the traditional cancer treatment. Different technologies have

been developed leading to possibility of producing more monoclonal antibodies for treating and detecting many diseases.

1. Zehra E., Mouhamad R., Esteban C., Vicki S. and Veysel K. (2017). The state-of-play and future of antibody therapeutics, Advanced Drug Delivery Reviews 122; 2–19.
2. Nicholas A. B., Simon J. H., Mary M., Jacintha M. S. and Lolke H. (2012). Monoclonal antibody therapeutics: history and future, Current Opinion in Pharmacology, 12:615–622
3. Hilal A. P., Shivangi S., Sweety S., Tripti S., Shubbir A., Chandresh S., and Rajesh K. (2020). Hybridoma technology a versatile method for isolation of monoclonal antibodies, its applicability across species, limitations, advancement and future perspectives, International Immunopharmacology 85,1066392.
4. Vibeke S., Alejandro B., Jamal A., Leonor B. F.,Takahiko H., Tsutomu T., Sadiq L., Charles H., Blerina K., Lisa M. (2017). Immunogenicity of Biologics in Chronic Inflammatory Diseases: A Systematic Review BioDrugs 31:299–316.
5. Oliver S., Simona C., Florian K., Anton G., and Christoph H. (2014). Microbials for the production of monoclonal antibodies and antibody fragments, Trends in Biotechnology 32 (1): 54-60.

MEDICAL DATA AUGMENTATION GENERATOR BASED ON GIVEN FILE FOR RESEARCH PURPOSES

Aristova E.V.[1], Smirnov A.A.[1]
[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia B.N.Yeltsin, Institute of Physics and Technology, Ekaterinburg, Russia
E-mail: aristova020303@gmail.com

The generator for augmentation of medical datasets for research purposes and usage as training dataset for machine learning algorithms used in medicine.

The main problem with using machine learning methods in medical and biological research is the serious lack of data for training them. For the most part, datasets cannot be created, augmented, or published due to the confidentiality of patient medical data. While there are many datasets available, most of them contain too few objects to create accurate machine learning models based on them.

This generator provides an opportunity to extend the original dataset based on the data already available. The basic principle of work is based on the analysis of the available data for each object on the basis of its class, defining the range of values of each parameter in each class. To generate new data based on the ranges obtained, random selection of the value in the corresponding range is used, which allows to create a sufficiently large number of unique combinations of parameters.

The main areas of application of this project are medical research, as well as data generation data for testing and training machine learning models.

1. "Exploring Transformer Text Generation for Medical Dataset Augmentation" by Ali Amin-Nejad, Julia Ive, Sumithra Velupillai; In Proceedings of the Twelfth Language Resources and Evaluation Conference, pages 4699–4708, Marseille, France. European Language Resources Association.

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ БИОСОВМЕСТИМЫХ ПЕРОВСКИТНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК

Асабин Д.А.[1], Романова Д.С.[1], Новикова С.А.[1], Грибова Е.Д.[1]
[1)] Государственный университет «Дубна»
E-mail: gloogle1234@yandex.ru

BIOCOMPATIBLE PEROVSKITE QUANTUM DOTS: SYNTHESIS AND INVESTIGATION OF PHYSICOCHEMICAL PROPERTIES

Asabin D.A.[1], Romanova D.S.[1], Novikova S.A.[1], Gribova E.D.[1]
[1)] Dubna State University

The work is devoted to the development of a biocompatible polymer for coating unstable perovskite quantum dots to use them in lateral flow test.

Большой интерес вызывают перовскитные квантовые точки (ПКТ) в виду их высокой фотостабильности и яркости флуоресценции. ПКТ имеют широкое применение во многих таких областях, как оптике (для создания фотодиодов) [1], медицине (в качестве биомаркеров для диагностики опухулей) [2] и энергетике (в качестве элемента солнечных панелей) [3]. Технологии на их основе оказываются наиболее перспективными из-за возможности регулирования оптических и электронных свойств, которые зависят от состава и размера ПКТ.

Большой проблемой в области синтеза и дальнейшего использования является их стабильность. Для решения этой проблемы в ПКТ внедряют полимерные системы как природные, так и синтетические. Их внедрение улучшают люминесцентные свойства ПКТ. Полимеры могут быть источниками дополнительных функциональных групп, которые способствуют конъюгации ПКТ с биомолекулами.

Одним из методов является покрытие ПКТ полиэдральным олигомерным силсесквиоксаном (POSS), называемые также сферосиликатами. POSS представляет собой каркасную структуру из неорганического силоксанового ядра с восемью окружающими органическими угловыми группами. Эти угловые группы служат дополнительными функциональными группами, способствующие протеканию конъюгации с биомолекулами.

В данной работе проведен синтез $CsPbBr_3$ ПКТ и органического покрытия POSS-$((CH_2)_3NHCO(CH_2)_2COOH)_8$, или же POSS-$(COOH)_8$ Данное покрытие является наилучшим вариантом для модификации ПКТ, так как оно обеспечивает стабильность ПКТ и является источником карбоксильных групп –COOH, которые посредством ковалентных взаимодействий будут прикрепляться к $–NH_2$ группам биомолекул.

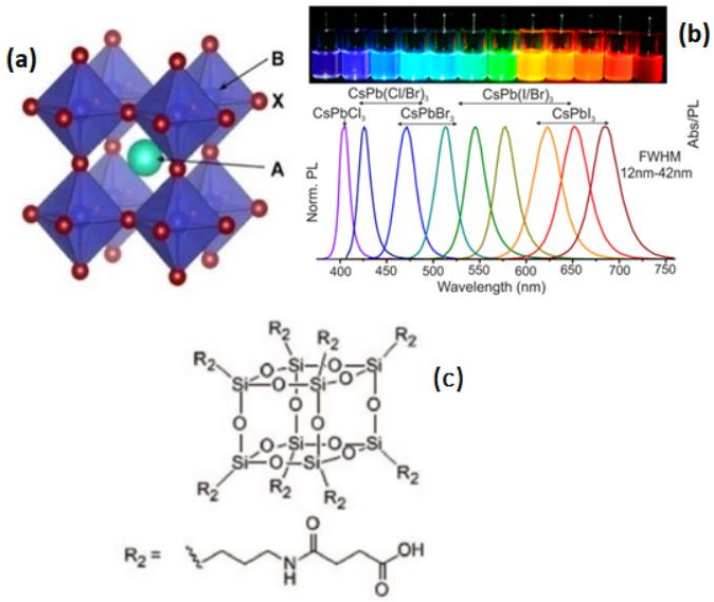


Рис. 1. (a) Схематическая структура кубической перовскитной решетки ABX3, (b) Зависимость спектра поглощения ПКТ от её состава [1], (c) Структурная формула POSS-(COOH)8 [4]

1. M.V. Kovalenko, L. Protesescu, M.I. Bodnarchuk, Properties and potential optoelectronic applications of lead halide perovskite nanocrystals. Science 358, 745–750 (2017).
2. Zhou Y., Wang Y. (ed.). Perovskite Quantum Dots: Synthesis, Properties and Applications. – Springer Nature, 2020. – T. 303.
3. Dias J. A. et al. Perovskite Quantum Dot Solar Cells: An Overview of the Current Advances and Future Perspectives //Solar RRL. – 2021. – T. 5. – №. 8. – C. 2100205.
4. Yuan H. et al. A novel poly (L-glutamic acid) dendrimer based drug delivery system with both pH-sensitive and targeting functions //Molecular Pharmaceutics. – 2010. – T. 7. – №. 4. – C. 953-962.

PHYSICOCHEMICAL PROPERTIES OF FERMENTED SOYMILK WITH ADDITION OF XANTHAN GUM

Asase R.V.[1], Selezneva I.S.[1], Glukhareva T.V.[1]
[1)] Institute of Chemical Engineering, Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia.
E-mail: richardasase@gmail.com

The abstract describes the physicochemical and sensory properties of fermented soymilk as affected by the addition of commercial xanthan gum. Specifically, the laboratory production of soymilk and effect of the addition different concentration of commercial xanthan gum on the fermented soymilk.

Fermented soymilk is a plant-based non-dairy product of great nutritional interest that is widely accepted in both developed and developing countries as a milk alternative. Poor stability has been an urgent problem to solve of the fermented soymilk products over past several years. Therefore, there is the need to fortify this product with stabilizing agents such as xanthan gum [1]. It is known that xanthan gum has the ability to form emulsions including gel formation to improve texture and stability in food formulations [2]. Soymilk has been prepared in the laboratory (1:10 w/v) and different concentrations (0.05%, 0.10%, 0.15%, and 0.20%) has been added to soymilk samples.

Fermented soymilk was prepared using starter culture (Streptococcus thermophilus and Lactobacillus bulgaricus). Results from the study show that, xanthan gum in different concentration does not affect the titratable acidity (1.84 % for all samples) and the pH (4.70 for all samples) of the fermented soymilk. However, it was found that, the addition of xanthan gum in an amount of up to 0.1% makes it possible to obtain fermented soymilk with a more stable gel. This result is in consistent with data of Raikos et al (2020) who also observe that, gels have the ability to improve on the physicochemical properties of fermented plant-based milk by increasing water holding capacity and decreasing syneresis [3]. This is due to the cross-linked between polysaccharides and protein molecule formed denser and aggregated networks allowing composite gel to intercept water. The sample with 0.1% xanthan gum exhibited the best organoleptic property.

In conclusion, the study suggests that the inclusion of xanthan gum up to 0.1% in fermented soymilk is capable of improving the physicochemical and organoleptic properties of the product making it more acceptable by consumers.

The research funding from the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (Ural Federal University Program of Development within the Priority-2030 Program) is gratefully acknowledged.

1. X. Kong, et al., "Physicochemical, textural, and sensorial properties of soy yogurt as affected by addition of low acyl gellan gum," Gels, vol. 8, no. 453, 2022.
2. J. T. Kure, et al., "Production and characterization of xanthan gum by bacterial isolates," CJPL, vol. 10, no. 1, pp. 2354-3485, 2022.

3. V. Raikos, et al., "Physicochemical properties, texture, and probiotic survivability of oat-based yogurt using aquafaba as a gelling agent," Food Science & Nutrition, vol. 8, no. 12, pp. 6426-6432, 2020.

ПОИСК ОПТИМАЛЬНЫХ ПУТЕЙ ИЗВЛЕЧЕНИЕ БАВ ИЗ ВЫСУШЕННЫХ ЛИСТЬЕВ MORINGA OLEIFERA

Беккулова Р.Ф.[1]
[1)] Уральский Федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина,, Екатеринбург, Россия
E-mail: tynafa@rambler.ru

SEARCH FOR OPTIMAL WAYS TO EXTRACT BAS FROM DRIED LEAVES OF MORINGA OLEIFERA

Bekkulova R.F.[1]
[1)] Ural Federal University named after the First President of Russia B. N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia

Different types of extraction of dried leaves of the olives moringa plant in different solvents were carried out. As a result of the physico-chemical methods of analyzing the obtained data, the chemical composition of the plant was established, the most effective type of extraction and solvent were

Растение Moringa oliefira в своём составе содержат огромный спектр биологически активных соединений, которые могут быть получены из различных растительных структур, таких как листья, семена, стебли, цветы, корни и шелуха стручков. Эти биологически активные молекулы включают углеводы, фенольные соединения, масла и жирные кислоты, белки и функциональные пептиды и обладают большим потенциалом для использования в различных рецептурах пищевых продуктов [1].

Порошок из высушенных листья растения был приобретён в Италии. Растительные экстракты готовили в 4 разных растворителях.

Образцы массой 5 г добавляли в коническую колбу и смешивали с различными экстракционными растворителями (100 мл этанол 95%, этилацетат, ацетон) при комнатной температуре (30°C) в течение 24 ч. Через 24 часа настойки фильтровали на вакуумной фильтровальной установке, затем для концентрирования центрифугировали в течение 10 минут на 6000об/мин.

Супернатанты упаривали досуха при 40°C с использованием роторного испарителя. Конечный экстракт анализировали с применением физико-химических методов анализа, а именно: ИК Фурье спектроскопия, ВЖЭХ, масс-спектрометрия [2].

Высушенные порошкообразные листья массой 5 г помещали в колбу и экстрагировали объёмом 250 мл в аппарате Сокслет. Экстракция проводилась при пяти циклах / час до истощения (20 ч) [3].

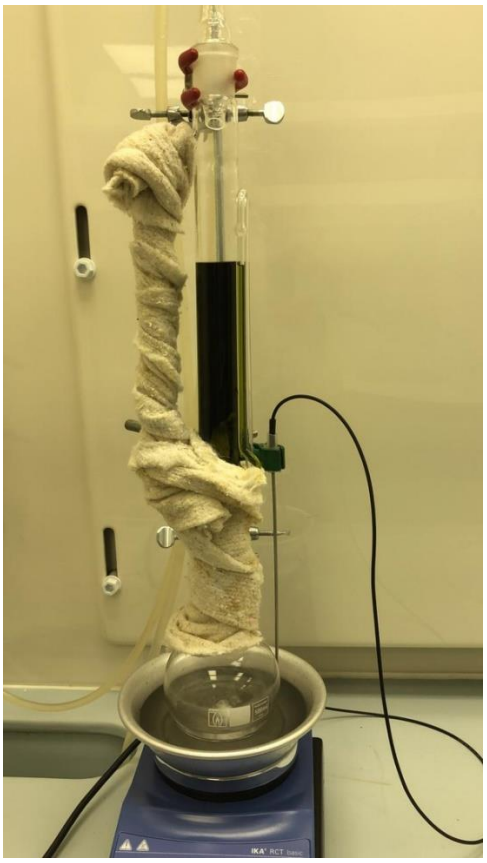


Рис. 1. Экстракция в аппарате Сокслета

Комбинированный экстракт из каждого метода экстракции отдельно фильтровали через фильтр. Фильтрат высушивали при пониженном давлении и температуре 50°C, используя роторный вакуумный испаритель [4].

Приготовление водных экстрактов из порошка листьев моринги. Кипяченую горячую дистиллированную воду (100 °C; 100 мл) наливали в стакан содержащий 5 г порошка листьев моринги. Стакан был накрыт алюминиевой фольгой и варили в течение 30 мин при перемешивании. Заваренная смесь была охлаждена до 60 °C и затем фильтровали. Отфильтрованный растворитель концентрировали с использованием роторного испарителя при 50 °C.

Для подтверждения изменения качественного химического состава были сняты спектры на ИК Фурье спектрометре ALPHA с НПВО-приставкой в области 400- 4000 см-1.

В ИК–спектрах присутствует широкая полоса с максимумом при 3400 см-1 соответствует валентным колебаниям гидроксильной группы υ (OH).

Узкие длинные полосы с максимумами при 2840 и 2915 см-1 относятся к валентным симметричным (υs) и валентным ассиметричным (υas) колебаниям CH2 групп.

Была проанализирована антиоксидантная активность. Самое высокое значение в листьях по сравнению с другими частями, такими как корни, кора и цветы. Фенольные соединения были количественно определены с помощью

ВЭЖХ, флавонолы и гидроксибензойные кислоты преобладали в листьях больше чем в остальных частях растения.

Содержание полифенольного соединения - мирицетин составило - 925 ± 5 мкг/г; природное биохимическое вещество группы флаовоноидов – кверцетин - 1100 ± 5 мкг/г; гентизиновая кислота - 65 ± 5 мкг/г; О-метилированный изофлавон - 35 ± 5 мкг/г.

1. Moringa oleifera: Characteristics and Uses for Human Health/ International Journal o f Molecular Sciences Int. J. Mol. Sci. 2016, 17, 2141; doi:10.3390/ijms17122141.
2. Bioactive flavonoids in Moringa oleifera and their health-promoting properties/ Journal of Functional Foods 47 (2018) 469–479 Journal of Functional Foods journal homepage: www.elsevier.com/locate/jff.
3. Chemical Composition, Antibacterial and in vitro Anti-Inflammatory Potentials of Essential Oils from Different Plant Parts of Moringa oleifera Lam/American Journal of Biochemistry and Biotechnology Original Research Paper 2018 Medicinal Plants and Economic Development (MPED) Research Centre, Department of Botany, University of Fort Hare, Alice 5700, South Africa.
4. Moringa plants: Bioactive compounds and promising applications in food Products/ Food Research International 111 (2018) 438–450 Food Research International journal homepage: www.elsevier.com/locate/foodres.

МОБИЛЬНАЯ РАДИОМЕТРИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ДЛЯ РУЧНОГО ДИНАМИЧЕСКОГО И СТАТИЧЕСКОГО СКАНИРОВАНИЯ

Бочкарев Ю.А.[1], Хохлов К.О.[1], Панкин В.В.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: yuraboch@mail.ru

MOBILE RADIOMETRIC SYSTEM FOR MANUAL DYNAMIC AND STATIC SCANNING

Bochkarev Yu.A.[1], Khokhlov K.O.[1], Pankin V.V.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The aim of the work is to develop a device for the implementation of medical radiometry with the possibility of autonomous operation.

В современной клинической медицине широко применяются методы радионуклидной диагностики. Самыми компактными среди устройств РНД являются портативные гамма-детекторы. Они используются для прижизненных морфологических исследований, в том числе в интраоперационный период. Данные устройства предоставляют врачу в режиме реального времени информацию о распространенности патологического процесса для определения границ тканей, подлежащих удалению. Методика позволяет минимизировать физическое проникновение внутрь организма, и, как следствие, снизить травматичность операции. [1,2]

В данный момент на кафедре экспериментальной физики УрФУ при поддержке ООО «УралНаноТех» разрабатывается одноканальный радиометр для ручного динамического и статического сканирования. Детектирующий блок состоит из сцинтилляционного кристалла CsI(Tl), с монтированным на нем кремниевым фотоэлектронным умножителем модели MicroFC-30035-SMT. Твердотельные ФЭУ имеют температурную зависимость коэффициента усиления. В связи с этим предусмотрена термокомпенсация напряжения питания для сохранения постоянного коэффициента усиления. На плате так же находятся:

- тракт усиления и обработки сигнала;
- счетная система;
- микроконтроллер;
- Bluetooth модуль для передачи данных на компьютер и настройки устройства;
- стабилизаторы напряжения питания.

Одноканальный радиометр планируется использовать для разработки новых, а также усовершенствования уже существующих методов радионуклидной диагностики. Будут произведены фантомные исследования и с использованием

различных коллиматоров для определения оптимальных характеристик устройства.

Текущая версия имеет два компаратора и способна регистрировать одновременно излучение от двух разных гамма-излучающих РФП. В следующей версии устройства предусмотрен спектрометрический режим работы для определения используемых радионуклидов и подстройки напряжения сравнения компараторов для корректной работы радиометра.

Во время хирургических операций используется коагуляторы и другое ЭХВЧ оборудование. Для стабильной работы одноканальной радиометрической системы в интраоперационный период необходимо экранировать палату от внешних помех: поместить её в металлический корпус. К сожалению, наличие Bluetooth модуля исключает возможность использования цельного металлического корпуса. В связи с этим необходимо разработать проводную версию устройства, которая работает стабильно в поле действия ЭХВЧ оборудования.

1. Koksharov V.A., Kortov S.V., Bazhukov S.I. Medicine target projects, 12 (2013)
2. Pankin S.V., Sarychev M.N., ANRI, 2, 40-47 (2018)

МОДЕЛИ РЕГУЛЯЦИИ ТРАНСПОРТА ИОНОВ В КЛЕТКАХ ЖИВОТНЫХ

Бондарь В.В.[1], Мелких А.В.[1]
[1)] Физико-технологический институт, Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: muksun20001@gmail.com

MODELS OF REGULATION OF ION TRANSPORT IN MAMMALIAN CELLS

Bondar V.V[1], Melkikh A.V.[1]
[1)] Institute of Physics and Technology, Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

There are very few full-fledged models describing the regulation of ions inside cells in the literature. In this paper, modeling of active and passive transport in animal cells is carried out.

В настоящее время известно большое количество транспортных систем, регулирующих обмен ионами между внутренней частью живой клетки и окружающей средой. Однако полноценных моделей, описывающих эту регуляцию в литературе крайне мало. Актуальность этой темы подчеркивается тем, что различные болезни тем или иным способом связаны с изменением в работе ионных транспортных систем.

Целью данной работы является моделирование активного и пассивного транспорта в клетках животных. Пассивный и активный способ регуляции являются основными в живых системах. Первый осуществляется без затрат энергии, когда ионы перемешаются вдоль электрохимического градиента через мембрану клетки. Второй подразумевает использование дополнительной энергии, так как в этом случае ионы переносятся против поля. Работая вместе или по отдельности данные транспортные системы поддерживают гомеостаз клетки. В основу модели вошли принципы, предложенные в более ранних работах [1, 2].

Были построены модели, на основе которых можно не только найти независимо концентрации основных ионов внутри клетки и потенциал на мембране, но и предсказывать регуляцию этих ионов. В качестве основных ионов рассмотрены: натрий, калий, магний, кальций, стронций, цинк, литий, хлор, бикарбонат, протоны. Рассчитанные согласно нашей модели значения потенциала согласуется с экспериментальными данными.

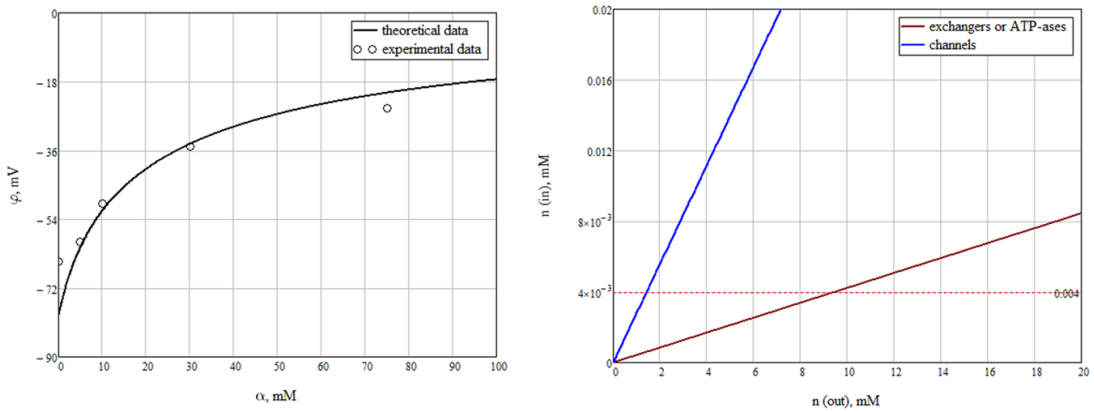


Рис. 1. Пример графиков для одного из регулируемых ионов. Кривая зависимости потенциала на мембране клетки от добавки иона в окружающую среду и график зависимости внутренней концентрации иона от внешней соответственно.

Анализ построенных графиков позволяет определять диапазоны внешних концентраций ионов, при которых работает только пассивный транспорт, только активный, активный и пассивный вместе.

Полученные зависимости внутренних концентраций ионов от внешних могут быть использованы в качестве первого приближения для понимания болезней, связанных с транспортом ионов.

1. Melkikh A.V., Seleznev V.D. Mechanisms and models of the active transport of ions and the transformation of energy in intracellular compartments. Progress in Biophysics and Molecular Biology. 2012. V. 109. Issues 1-2, 33-57.
2. Melkikh, A. V., Sutormina, M. (2020). Intra-and intercellular transport of substances: models and mechanisms. Progress in biophysics and molecular biology, 150, 184-202.

РАЗРАБОТКА АЛГОРИТМА ПОДАВЛЕНИЯ ТЕНЕЙ ОТ РЕБЕР И КЛЮЧИЦ НА ФЛЮОРОГРАФИЧЕСКИХ СНИМКАХ С ПРИМЕНЕНИЕМ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Чечулина М.Ю.[1], Смирнов А.А.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина
E-mail: marycherry283@gmail.com

CHEST X-RAY RIBS AND CLAVICLES SUPPRESSION VIA MACHINE LEARNING METHODS

Chechulina M.Yu.[1], Smirnov A.A.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The existence of structures such as ribs and clavicles in chest X-ray images can cover subtle findings. The purpose of this study is to build a machine learning based bone suppression model that recognizes and removes occluding structures in frontal chest radiograms reducing diagnostic errors.

Флюорография (ФЛГ) грудной клетки – наиболее распространенный метод диагностики лёгочных патологий, представляющий собой рентгенографическое исследование органов грудной клетки в одной проекции. ФЛГ отличается дешевизной, быстротой и простотой, что делает ее незаменимым инструментом для массовых профилактических обследований.

Наличие всего одной проекции исследования приводит к необходимости анализа изображения с наложением теней от анатомических структур. Тени костей значительно затрудняют обнаружение перекрытых ими слабо различимых образований в легких, поэтому разработка методов подавления теней костных структур является развивающимся направлением в отрасли обработки рентгенографических изображений. Вычитая плотности костных структур, можно добиться улучшения качества видимости мягких тканей и повышения диагностической ценности изображения.

Целью данной работы является разработка алгоритма подавления теней от ребер и ключиц на флюорографических снимках с применением методов машинного обучения.

1. Rajaraman, S., Zamzmi, G., Folio, L., Alderson, P., & Antani, S. (2021). Chest X-ray Bone Suppression for Improving Classification of Tuberculosis-Consistent Findings. Diagnostics, 11(5), 840.
2. Морозов С.П., Кокина Д.Ю., Павлов Н.А., Кирпичев Ю.С., Гомболевский В.А., Андрейченко А.Е. Клинические аспекты применения искусственного интеллекта для интерпретации рентгенограмм органов грудной клетки. Туберкулез и болезни легких. 2021;99(4):58-64.

ЛОКАЛИЗАЦИЯ ПОВЕРХНОСТНЫХ ЭЛЕКТРОДОВ НА МИОКАРДЕ ПРИ ОТКРЫТОЙ ОПЕРАЦИИ НА СЕРДЦЕ ПРИ ПОМОЩИ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

Чернобровкин Т.В.[1], Курсанов А.Г.[1, 2]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Институт Иммунологии и Физиологии Уральской Академии Наук, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: tima123124@mail.ru

LOCALIZATION OF SURFACE ELECTRODES ON THE MYOCARDIUM IN OPEN HEART SURGERY USING NEURAL NETWORKS

Chernobrovkin T.V.[1], Kursanov A.G.[1, 2]
[1)] Ural Federal University named after the First President of Russia B.N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia
[2)] Institute of Immunology and Physiology of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia

This research presents a technique for detecting cardiac surface electrodes using neural networks. Using the obtained data, point motion analysis is performed to localize and numerically estimate tissue twisting.

По данным ВОЗ за период 2000–2019 год сердечно сосудистые заболевания (ССЗ) занимают лидирующую позицию среди причин смертности во всем мире [1]. Одним из ССЗ является ишемическая болезнь сердца (ИБС), возникающая вследствие нарушения кровоснабжения сердечных тканей. Следствием ИБС может быть инфаркт миокарда, сопровождаемый фибрилляциями желудочков. Не смотря на актуальность данная проблема ещё не достаточно изучена [2].

Для детектирования фибрилляций используется ЭКГ как золотой стандарт, однако данный метод в его классическом представлении не предполагает локализацию фибрилляции [3]. Для локализации используются накладываемые электродные сетки для снятия ЭКГ со многих точек сердечной ткани с целью детектирования протекающих в сердце токов. Однако данная методика не предоставляет чистоты эксперимента ввиду вмешательства в работу сердца. Поскольку фибрилляции приводят к закручиванию сердечной ткани предоставляется возможным анализ этого закручивания посредством обработки видео сокращающегося сердца.

Нами уже был разработан алгоритм локализации и численной оценки закручивания степени миокарда на основе методики Particle Image Velocity [4] и применением численного анализа степени закручивания [5]. Для расширения возможных методов анализа фибрилляций и сравнения с раннее описанным

алгоритмом, в данной работе представлена методика детектирования поверхностных электродов сердца с использованием нейронных сетей. По полученным данным производится анализ движения точек для локализации и численной оценки закручивания ткани.

В качестве обучающей выборки нами использовались данные полученные в ходе экспериментов по модуляции ишемии миокарда путем окклюзии левой передней нисходящей коронарной артерии в течение 40 мин. На протяжении всего эксперимента проводили непрерывное 3-х отведений стандартное мониторирование ЭКГ для контроля параметров ЭКГ и оценки развития аритмий. Видеорегистрация движения передней стенки сердца проводилась до коронарной окклюзии, в течение 1 минуты после начала ишемии и каждые 5 минут до окончания 40-минутного интервала или возникновения фибрилляции желудочков.

1. “WHO reveals leading causes of death and disability worldwide: 2000-2019.” https://www.who.int/news/item/09-12-2020-who-reveals-leading-causes-of-death-and-disability-worldwide-2000-2019 (accessed Feb. 27, 2023).
2. J. Kornej, C. S. Börschel, E. J. Benjamin, and R. B. Schnabel, “Epidemiology of Atrial Fibrillation in the 21st Century: Novel Methods and New Insights,” Circ Res, vol. 127, no. 1, pp. 4–20, Jun. 2020, doi: 10.1161/CIRCRESAHA.120.316340.
3. T. Sanna et al., “Cryptogenic Stroke and Underlying Atrial Fibrillation,” N Engl J Med, vol. 370, no. 26, pp. 2478–2486, Jun. 2014, doi: 10.1056/NEJMoa1313600.
4. “OpenPIV: a python package for PIV image analysis. — OpenPIV 0.0.1a documentation.” https://openpiv.readthedocs.io/en/latest/ (accessed Mar. 21, 2022).
5. J. Zhou, R. J. Adrian, S. Balachandar, and T. M. Kendall, “Mechanisms for generating coherent packets of hairpin vortices in channel flow,” J. Fluid Mech., vol. 387, pp. 353–396, May 1999, doi: 10.1017/S002211209900467X.

РАЗРАБОТКА ФУНКЦИОНАЛЬНОГО ПРОДУКТА ДЛЯ ПРОФИЛАКТИЧЕСКОГО ПИТАНИЯ ШАХТЕРОВ

Черногузова Д.С.[1], Журавлева Д.А.[1], Селезнева И.С.[1]
[1)] Уральский федеральный университет
E-mail: diana.chernoguzova@mail.ru

DEVELOPMENT OF A FUNCTIONAL PRODUCT FOR PREVENTIVE NUTRITION OF MINERS

Chernoguzova D.S.[1], Zhuravleva D.A.[1], Selezneva I.S.[1]
[1)] Ural Federal University

Yoghurt samples enriched with vitamin D and meal fibers were prepared in order to obtain a functional fermented milk product designed to miners nutrition. Quality control of the experiment yoghurt samples parameters during their 14 days storage period was carried out.

Подземная работа связана со значительной физической нагрузкой, энергетические затраты у шахтеров могут колебаться от 3 500 до 5 000 ккал. В связи с этим питание шахтеров должно быть сбалансировано как по макро- так и по микронутриентам. Наряду с качеством питания важная роль в сохранении здоровья шахтеров и предупреждении профессиональных заболеваний принадлежит правильной организации питания в производственных условиях. Кисломолочные продукты можно порекомендовать для включения в рацион питания шахтеров, поскольку они богаты белками, жирами, витаминами и минералами в легко усвояемой для организма человека форме [1]. Следует отметить, что рабочие подземных профессий нуждаются в витамине D_3, поскольку значительную часть дневного времени в рабочее время они лишены солнечной инсоляции. Также установлено, что в рационе горнорабочих содержится недостаточное количество пищевых волокон [2].

В связи с этим цель данного исследования разработать рецептуру и получить функциональные кисломолочные продукты, а именно йогурты, обогащенные только витамином D_3 и в сочетании с пищевыми волокнами в составе овсяного β-глюкана, который дополнительно выполняет технологические функции стабилизатора и загустителя в продукте. Для получения йогурта использовали закваску лиофилизированных микроорганизмов Streptococcus thermophilus и Lactobacillus bulgaricus. В результате получили образцы йогурта с различным содержанием добавок. Установлено, что обогащение кисломолочного продукта витамином D_3 и пищевыми волокнами способствовало образованию хорошо сформированного сгустка и незначительного количества отделившейся сыворотки. Органолептические параметры полученных образцов не отличались от контроля. Образцы йогурта хранили в течение 14 суток при температуре 4-

6°С. Контролировали физико-химические и микробиологические показатели качества на 1, 7 и 14 сутки хранения. При этом установили, что все исследуемые образцы йогуртов соответствовали требованиям ГОСТ 31981–2013 Йогурты. Общие технические условия. Кроме того, в период хранения образцов патогенная микрофлора не обнаружена. Определена питательная и биологическая ценность, а также степень удовлетворения суточной потребности в пищевых волокнах, макро- и микронутриентах разработанных образцов. Таким образом, в результате проведенных исследований предложена рецептура и технология получения функциональных кисломолочных продуктов термостатным способом, которые могут быть рекомендованы при организации профилактического питания шахтеров.

РИД получен при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Программы развития Уральского федерального университета имени первого Президента России Б.Н. Ельцина в соответствии с программой стратегического академического лидерства "Приоритет-2030".

1. Горбатова К.К., Гунькова П.И., Химия и физика молока и молочных продуктов, ГИОРД, 336, (2012).
2. Семашко В. А., Особенности профессиональных патологий в угольной промышленности, ВГМУ, 79 (2011).

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКЦИИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ СОСТАВА МОЧЕВЫХ КОНКРЕМЕНТОВ

Чукина А.А.[1], Денисова О.В.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: Anastasia.Chukina@urfu.me

APPLICATION OF X-RAY DIFFRACTION METHODS TO STUDY THE COMPOSITION OF URINARY CONCREMENTS

Chukina A.A.[1], Denisova O.V.[1]
[1)] Ural Federal University named after the First President of Russia B.N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia

Urinary calculi are analysed in medical practice to prevent recurrence in patients with urolithiasis. The composition of the stone allows physicians to choose the right diet for the patient. In this paper we used X-ray diffraction to determine the composition of urinary concrements.

Анализ состава мочевых конкрементов является важным диагностическим методом при обнаружении у пациентов уролитиаза. Остановить рецидив заболевания и выбрать наиболее успешную стратегию лечения поможет понимание причин возникновения камня. Согласно современным представлениям, для этого необходимо знать, как химический, так и фазовый состав мочевого камня [1].

Как правило для рутинной диагностики используют инфракрасную спектроскопию (ИКС), позволяющую исследовать некристаллические компоненты камня и косвенным образом определить основные фазы, однако точное соотношение кристаллических фаз в камне, структурные параметры и особенности кристаллического строения, способные существенным образом повлиять на дальнейшее лечение, может дать только рентгеноструктурный анализ (РСА). Для научных целей используют сочетание ИКС и РСА, что дает возможность получить комплексное исследование образцов с учетом аморфной компоненты.

В данной работе мы использовали рентгеновскую дифракцию для определения состава мочевых конкрементов. Измерения проводились на дифрактометре X'Pert PRO MPD (Panalitycal) в излучении Cu K-α. Для анализа дифрактограмм и определения количественного фазового состава использовался метод Ритвельда .

В результате была обнаружена кристаллическая фаза струвита (Рис. 1), что указывает на инфекционный процесс в мочевыводящих протоках, продуцирующий выработку избыточного количества аммиака, а также фаза

оксалата кальция, возникающая при избытке гормона паратгормона, и разного рода метаболических расстройствах. Результаты исследования позволят в дальнейшем составить для конкретного пациента специальную диету, для предотвращения рецидивов.

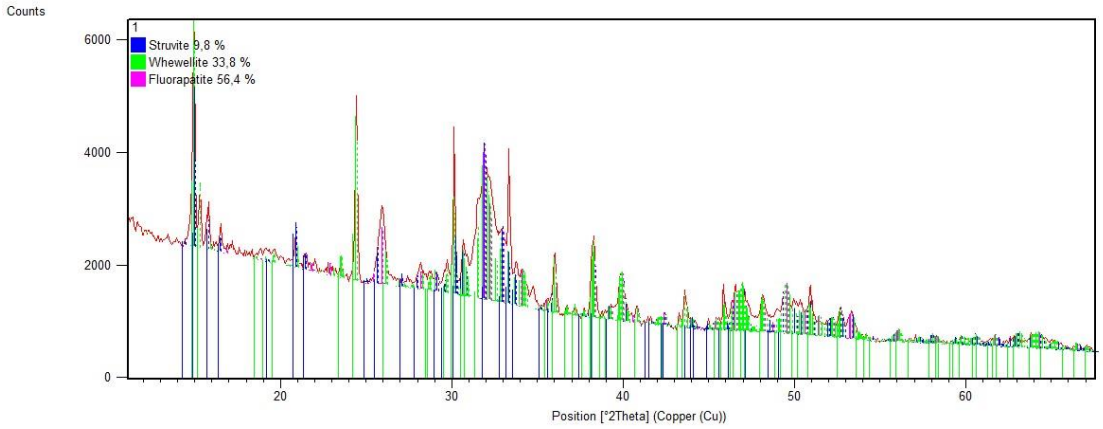


Рис. 1. Опытный образец мочевого камня

1. Низовский А.И., Бубнов А.В., Тренихин М.В., Вичканов А.Н. Рентгенофазовый и электронно-микроскопический анализ почечных камней и конкрементов // ОНВ. 1998. №4. URL: https://cyberleninka.ru/article/n/rentgenofazovyy-i-elektronno-mikroskopicheskiy-analiz-pochechnyh-kamney-i-konkrementov (дата обращения: 16.02.2023).
2. Абоян И. А., Скнар В. А., Павлов С. В., Золотухин Д. А. Опыт исследования состава 1000 мочевых конкрементов с использованием рентгенофазового анализа // БМИК. 2011. №4. URL: https://cyberleninka.ru/article/n/opyt-issledovaniya-sostava-1000-mochevyh-konkrementov-s-ispolzovaniem-rentgenofazovogo-analiza (дата обращения: 16.02.2023).

COMPARISON RESEARCH OF THE ANTIOXIDANT ACTIVITY OF RAW COCOA BEANS AND PROCESSED COCOA POWDER FROM DIFFERENT MANUFACTURING COMPANIES IN GHANA

Danyo E.K.[1, 2], Selezneva I.S.[1]
[1)] Ural Federal University, Russia
[2)] University of Health and Allied Sciences, Ghana
E-mail: e.kdanyo@gmail.com

The total content of polyphenols in cocoa powder was determined in the equivalent of tannic acid per gram of dry weight of the cocoa powder sample. The ABTS and DPPH free radical scavenging activity of cocoa powder extracts were evaluated in comparison with vitamin C.

Cocoa is known globally because of the products that are derived from it, especially chocolates. Raw cocoa bean has been recognized globally as one of the most nutritious foods, which protects the body against free radicals, heart diseases, and many types of cancer [1]. Cocoa powder contains good quantities of caffeine, theobromine, and methylxanthine peptides [2]. The aim of this study was to evaluate and compare polyphenolic content and the antioxidant activity of raw cocoa beans and processed cocoa powder obtained from different food companies in Ghana. To identify whether technological processes involved in cocoa powder production can affect the levels of polyphenols in the product compared with raw cocoa powder.

The result of our study showed the total polyphenolic content in the cocoa powder ranged from 1.0–1.8 mg tannic acid equivalent per gram dry weight of the cocoa powder sample (mg TAE/g). The raw cocoa powder and the processed cocoa powder samples contained good amount of polyphenols. Therefore, the cocoa samples should have antioxidant activity. We established that the technological processes involved in cocoa powder production have not changed the total amount of polyphenols in the cocoa powder samples. The antioxidant activity of the cocoa powder samples did not change too. The cocoa powder extracts demonstrated good free radical scavenging activity. The ABTS (2,2'-azino-bis(3-ethylbenzothiazoline-6-sulfonic acid)) and DPPH (2,2-diphenyl-1-picrylhydrazyl) radical scavenging activities of the extracts ranged from 64–80 and 39–62 % inhibitions, respectively. The extracts' ferric-reducing antioxidant potential (FRAP) values ranged from 0.5 to 0.83. The raw cocoa powder sample demonstrated higher ABTS and ferric reducing antioxidant scavenging activity compared to the processed samples. However, the processed cocoa powder samples have higher DPPH scavenging activity compared to the raw cocoa powder samples. The antioxidant activity all samples were lower than vitamin C as control.

We would like to thank Dr Kabotso Elorm senior lecturer of the University of Health and Allied Sciences for his contribution to this research.

1. Latif R. Curr Opin Clin Nutr Metab Care.16(6):669–74. (2013).
2. Perez M, Lopez-Yerena A, Vallverdú-Queralt A. Crit Rev Food Sci Nutr. 62(2):475–89 (2022).

МОДЕЛИРОВАНИЕ ИММУНОДЕФИЦИТНОГО СОСТОЯНИЯ НА МОДЕЛЯХ ЛАБОРАТОРНЫХ ЖИВОТНЫХ (МЫШЕЙ)

Демичева Е.И.[1, 2], Поланко Ф.Е.[1], Ушенин К.С.[1, 2], Соловьева О.Э.[1, 2]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина
[2)] Институт иммунологии и физиологии Уральского отделения Российской академии наук
E-mail: fimby@mail.ru

MODELING OF IMMUNODEFICIENCY STATE INMODELS OF LABORATORY ANIMALS (MICE)

Demicheva E.I.[1, 2], Polanco F.E.[1], Ushenin K.S.[1, 2], Solovyova O.E.[1, 2]
[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia B.N.Yeltsin
[2)] Institute of Immunology and Physiology of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences

The text of the report presents a concept of modeling of an immunodeficiency state in mice. The repot includes description of the occuring alterations in the immune system, used techniques, and brief results obtained during comparison healthy and immunodeficient mice.

На сегодняшний день иммунодефицитные состояния являются одними из самых актуальных проблем. Они возникают при наличии других сопутствующих заболеваний, при развитии онкологии и тяжело переносятся пациентами. Для изучения подобных состояний, а также подбора эффективных лекарственных препаратов применяются методы моделирования заболеваний на животных. В докладе представлено описание моделирования иммунодефицитного состояния на мышах с применением препарата циклофосфан. Для оценки эффективности модели использовалось измерение липидного профиля (метаболитов) в крови исследуемых животных. Уровень липидов оценивался с использованием методов высокоэффективной жидкостной хроматографии с масс-спектрометрией и биоинформатических подходов, сопряженных со сферой метаболомики. Представлены различия между уровнями липидов, наблюдаемые между здоровыми особями мышей и мышей с пониженным иммунитетом. В докладе также представлены перспективы использования подобной модели для диагностики иммунодефицитных состояний.

The research funding from the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (Ural Federal University Program of Development within the Priority-2030 Program) is gratefully acknowledged.

1. Belizario, Joe. (2009). Immunodeficient Mouse Models: An Overview. The Open Immunology Journal - OPEN IMMUNOL J. 2. 79-85. 10.2174/1874226200902010079.

КУЛЬТИВИРОВАНИЕ FUSARIUM VERTICILLOIDES С ЦЕЛЬЮ БИОСИНТЕЗА ГИББЕРЕЛЛИНОВ

Дернина Д.Д.[1], Журавлева Д.А.[1], Глухарева Т.В.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина
E-mail: ddernina@yandex.ru

CULTIVATION OF FUSARIUM VERTICILLIOIDES FOR THE PURPOSE OF GIBBERELLIN BIOSYNTHESIS

Dernina D.D.[1], Zhuravleva D.A.[1], Glukhareva T.V.[1]
[1)] Ural Federal University named after the First President of Russia B.N. Yeltsin

The Fusarium verticillioides strain F-446 was cultured on nutrient media of various compositions for the purpose of gibberellins biosynthesis. The yields of dry biomass and gibberellins were compared. The gibberellins isolation method by precipitation them with iron (III) chloride was also tested.

Гиббереллины – обширная группа фитогормонов с более чем 120 представителями. Наиболее распространенными и изученными активными формами гиббереллинов являются GA_3 (гибберелловая кислота), GA_4 и GA_7 (рис. 1). Их физиологическое действие проявляется в стимуляции ростовых процессов растений за счет усиления растяжения клеток и повышения митотической активности меристематических тканей. Гиббереллины ингибируют действие продуктов генов, подавляющих рост растения. Сегодня эти вещества и препараты на их основе находят широкое применение в сельском хозяйстве. Их используют как стимуляторы и регуляторы роста побегов, а также в борьбе с различными стрессовыми воздействиями окружающей среды [1,2]. На территории РФ промышленное получение гиббереллинов не развито. Однако в связи с расширением агропромышленных комплексов, стремлением к импортозамещению зарубежных препаратов на отечественном рынке удобрений исследования по разработке эффективной технологии получения гиббереллинов являются актуальными. Цель данной работы заключалась в отработке технологии ферментации продуцента гиббереллинов – плесневого гриба Fusarium verticilloides на питательных средах различного состава и отработки метода выделения конечного продукта.

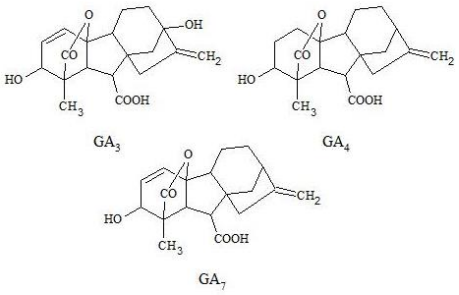


Рис. 1. Важные структуры активных гиббереллинов

При проведении работы в качестве объекта исследования был выбран штамм Fusarium verticillioides F-446 из Всероссийской коллекции промышленных микроорганизмов, являющийся продуцентом гиббереллинов типа GA_4 и GA_7. С целью подбора оптимальных условий получения гиббереллинов культивирование продуцента осуществляли на трех питательных средах различного состава: картофельно-глюкозный бульон, среды на основе подсолнечного масла и глицерина. Выделение гиббереллинов из культуральной жидкости проводили путем их осаждения ионами трехвалентного железа [3]. Идентификацию продукта осуществляли методом ТСХ с использованием пластины ПТСХ-АФ-А-УФ в системе элюента – смесь этанол:вода:муравьиная кислота (80:20:0,5), растворитель – метанол [4]. В качестве эталона использовали гиббереллиновую кислоту (PanReac Applichem, США).

В ходе выполнения работы наибольший выход сухой биомассы (10,04 г/л) и гиббереллинов (215,56 мг/л) был получен при ферментации продуцента на питательной среде с глицерином.

РИД получен при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Программы развития Уральского федерального университета имени первого Президента России Б.Н. Ельцина в соответствии с программой стратегического академического лидерства "Приоритет-2030"

1. Mulan Wang, Jiaqi Chen, Xudong Zhang [et. al.], Industrial Crops and Products, Vol. 167 (2021)
2. Candido Camara, Marcela Vandenberghe, Luciana Rodrigues [et. al.], Planta, Vol. 248 (2018)
3. Муромцев Г.С., Раковский Ю.С., Крутова Л.Р., Первий Э.Н., Пат. 287968 СССР, МПК C12P27/00 (1970)
4. David W.Pearce, MasajiKoshioka, Richard P.Pharis, Journal of Chromatography, Vol. 658, 91-122 (1994)

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ПОИСКА ПЕРОВСКИТОПОДОБНЫХ СОЕДИНЕНИЙ С НАИЛУЧШЕЙ ЭФФЕКТИВНОСТЬЮ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ СОЛНЕЧНОЙ ЭНЕРГИИ

Федотова Е.В.[1], Смирнов А.А.[1], Новоселов И.Э.[1]
[1)] Уральский федеральный университет
E-mail: elenfedotova99@yandex.ru

APPLICATION OF MACHINE LEARNING METHODS TO SEARCH FOR PEROVSKITE-LIKE COMPOUNDS WITH THE BEST EFFICIENCY OF SOLAR ENERGY CONVERSION

Fedotova E.V.[1], Smirnov A.A.[1], Novoselov I.E.[1]
[1)] Ural Federal University

Perovskite like compounds is promising because of their relative cheapness, ease of production and efficiency of solar energy conversion. However, such structures can be unstable. With the help of machine learning methods, one could predict solar cell structures with high PCE.

Гибридные органо-неорганические перовскитоподобные галогениды состава ABX_3: A — органические или неорганические однозарядные катионы (например, метиламмония $CH_3NH_3^+$, формамидиния $CH(NH)NH_3^+$, цезия Cs^+),

B – двухзарядный катион металла (например, Pb^{2+}, Sn^{2+}) и X – анионы галогенов (I^-, Br^-, Cl^-) – привлекло внимание многих исследователей. Относительная дешевизна, простота изготовления и эффективность преобразования солнечной энергии, достигающая до 25,7%, делают данные соединения перспективными [1]. Однако вопрос, связанный с устойчивостью таких структур, малоизучен, что затрудняет поиск соединений с высоким PCE.

В последние годы активно применяются методы машинного обучения в различных областях, в том числе в материаловедении. Для этого анализируется огромное количество структур химических соединений и исследуется их физико-химическая активность [2]. Результат такого анализа – модель, способная предсказать свойства какого-либо соединения или, наоборот, предсказание структуры с необходимыми характеристиками. С помощью методов машинного обучения можно спрогнозировать структуры, обладающие высоким PCE.

Открытый набор данных взят с сайта проекта «The Perovskite Database Project» [2], состоящий из более 43000 разных структур перовскитов.

Работа с признаками разбита на три этапа.

На первом этапе были использованы признаки, описывающие состав материала и его некоторые характеристики:

– Ион A в структуре соединения (Perovskite_composition_a_ions);

– Ион X в структуре соединения (Perovskite_composition_x_ions);

– Соотношение иона a структуры (Perovskite_composition_a_ions_coefficients);

– Соотношение иона X структуры (Perovskite_composition_x_ions_coefficients);

В качестве целевой переменной была выбрана преобразование эффективности солнечной энергии (JV_default_PCE).

Для дальнейшего анализа вышеприведенных параметров при помощи алгоритмов машинного обучения требуется предварительная обработка данных.

В качестве алгоритмов были выбраны линейная регрессия (Linear Regression), К-ближайших соседей (KNN), метод опорных векторов (SVR), регрессор на основе стохастического градиентного спуска (SGD Regressor), дерево решений (Decision Tree) и ансамблевые методы на основе деревьев решений.

Для оценки качества алгоритмов были взяты средняя квадратичная ошибка (MSE) и средняя абсолютная ошибка (MAE).

На данный момент наибольшую точность показал метод случайного леса (Random Forest) (MSE = 21,95%; MAE = 3,8%). На рисунке представлена диаграмма важности признаков при использовании данного алгоритма.

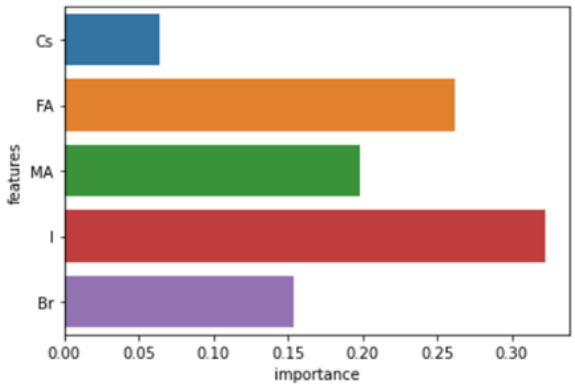


Рис. 1. Диаграмма важности признаков при использовании алгоритма Random Forest

Из диаграммы видно, что практически все признаки являются важными, кроме "Ион A в структуре соединения" (Cs). В дальнейшем планируется значительно расширить список признаков для улучшения оценки качества обучения алгоритма.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 22-61-00047

1. Best Research-Cell Efficiency Chart // National Renewable Energy Laboratory (NREAL): [Электронный ресурс]. URL: https://www.nrel.gov/pv/cell-efficiency.html (дата обращения: 16.02.2023).
2. Jacobsson T.J., Hultqvist A., García-Fernández A., et al. An open-access database and analysis tool for perovskite solar cells based on the FAIR data principles // Nat Energy. — 2021. — Vol. 7, № 1. — P. 107 – 115.

СТАТИЧЕСКИЕ И ДИНАМИЧЕСКИЕ ФАНТОМЫ ДЛЯ КАЛИБРОВКИ МОБИЛЬНЫХ МЕДИЦИНСКИХ ИЗМЕРИТЕЛЬНЫХ КОМПЛЕКСОВ РАДИОМЕТРИИ

Гасилова Е.К.[1], Вазиров Р.А.[1, 2], Панкин В.В.[1]
[1)] ФГАОУ ВО «УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», Екатеринбург, Россия
[2)] ФГБНУ "Уральский федеральный аграрный научно-исследовательский центр УрО РАН", Екатеринбург, Россия
E-mail: gasilovak@bk.ru

STATIC AND DYNAMIC PHANTOMS FOR CALIBRATION OF MOBILE MEDICAL RADIOMETRY MEASURING SYSTEMS

Gasilova E.K.[1], Vazirov R.A.[1, 2], Pankin V.V.[1]
[1)] Federal State Autonomous Educational Institution of Higher Education «Ural Federal University named after the first President of Russia B.N.Yeltsin», Ekaterinburg, Russia
[2)] Federal State Budgetary Scientific Institution «Ural Federal Agrarian Research Centre, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences», Ekaterinburg, Russia

The abstract presents the development of a dynamic fantom of the segment of the lymphatic flow system, which is created using 3D technologies, to determine the signal lymph node. Models are used to determine the signal lymph node and the residual amount of contrast agents in the system.

Одним из направлений радионуклидной диагностики является оценка физиологических и функциональных нарушении органов и тканей при помощи медицинского радиометра или гамма-камеры, а также оценка лимфатического тока с применением рентгеноконтрастных веществ. В настоящее время наблюдается проблема определения местоположения сигнальных лимфоузлов, связанная с отсутствием точных величин при измерениях с помощью радиометров, так как на данный момент используются радиометры индикаторного, а не измерительного типа.

Технология 3D-печати может помочь быстро разработать относительно недорогие персонализированные фантомы высокой сложности, которые будут полезны для визуализации или дозиметрических измерений [1].

Данное исследование применения аддитивных технологий в медико-биологической практике с источниками ионизационного излучения на примере разработки макета-фантома в сегменте системы лимфатического тока проводилось для калибровки медицинских диагностических радиометрических комплексов, в частности, для поиска сигнальных лимфатических узлов. Перспективы применения: полная калибровка медицинских диагностических радиометрических комплексов измерительного типа

В работе рассмотрены морфологическая организация и строение системы лимфатического тока; с помощью сервиса TinkerCad от Autodesk разработаны макеты-фантомы лимфотока в сегменте системы различных конфигураций, изготовлены на 3D принтере технологии FDM с использованием нити из пластика PLA (полилактид) со 100 % заполнением. Проведено тестирование макетов с помощью красителя метиленовый-синий. Изготовленный макет-фантома не только согласуется с морфологической организацией и строением, но и моделирует динамику изменения тока лимфы на протяжении эксперимента.

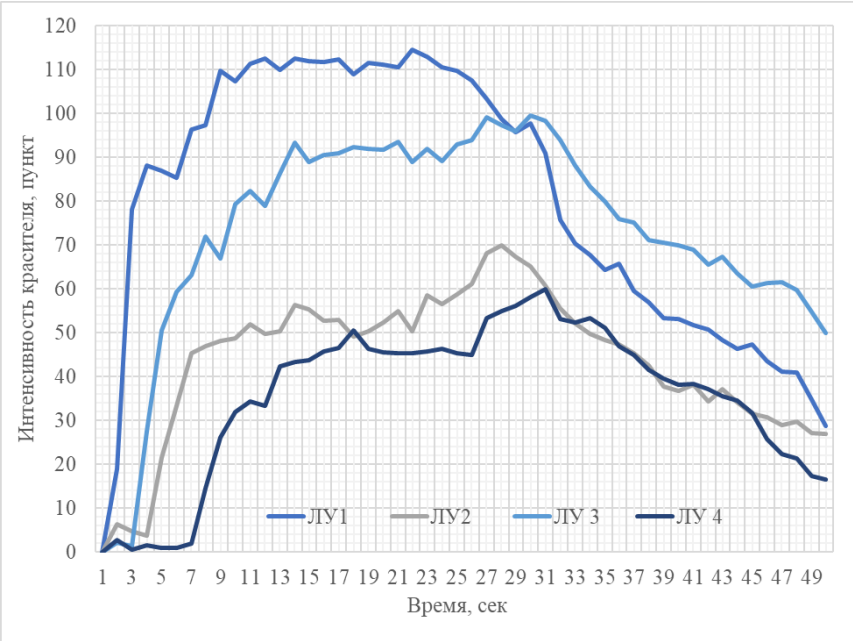


Рис. 1. График зависимости накопления красителя от времени для каждого прототипа лимфоузла системы

Был получен график зависимости накопления красителя от времени для каждого прототипа лимфоузла системы.

Данное решение позволяет повторить систему лимфатического тока и определить сигнальный лимфоузел с помощью поиска оптимального пути прохождения жидкости, а также определить остаточное количество красителя в системе, что соответствует остаточной радиоактивности при использовании радио-фармацевтического препарата, необходимой для определения местоположения патологий различного генеза.

1. Filippou, V. and Tsoumpas, C. (2018), Recent advances on the development of phantoms using 3D printing for imaging with CT, MRI, PET, SPECT, and ultrasound. Med. Phys., 45: e740-e760. https://doi.org/10.1002/mp.13058

HERPES SIMPLEX VIRUS

Ivantsova M.N.[1], Selezneva I.S.[1]
[1)] Institute of Chemical Engineering, Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia
E-mail: m.n.ivantsova@urfu.ru

Herpes infection is the most common infection among the adult population. The causative agent of the disease is Herpes simplex virus, which affects the skin, nerve cells, and human mucous membranes. Once in the human body, pathogens accumulate and manifest themselves with a weakened immune system.

According to scientists, almost 90% of the world's population are latent carriers of the Herpes Virus. Herpes, or herpes infection, is a disease caused by viruses of the Herpesviridae family. Eight species are known to science, among which the most common Herpes simplex simple type, namely Herpes Simplex Virus type 1 (HSV-1) and Herpes Simplex Virus type 2 (HSV-2) [1].

Variations of the Herpes Virus can infect almost the entire body and cause a number of very serious diseases, such as herpes of the lips, chicken pox, Herpes zoster (VZV), cytomegalovirus infection, as well as various forms of cancer and encephalitis [2]. A feature of the Herpesviridae family of viruses is that they all cause lifelong diseases, and pathogens can be inactive for a long time, proceeding without clinical manifestations.

The virus can enter the body in early childhood: at 3-4 years old, when the antibodies against the Herpes Virus transmitted to the baby by the mother are depleted. The Herpes Simplex Virus is spread by airborne, sexual, contact, transfusion routes, as well as during organ transplantation. Once in the human body, the Herpes Virus spreads through the bloodstream. It enters the nerve cells of the peripheral nervous system and integrates into the genome of neurons. Viruses HSV-1 or HSV-2 are able to interact very effectively with the human immune system, which explains the long latent period of the disease, allowing the virus to spread as much as possible in the body [3].

The virus can be activated as a result of increased physical or emotional stress, general exhaustion of the organism. Other diseases, such as fevers, injuries, hormonal changes, and skin lesions, can also become a risk factor.

That is why early and high-quality diagnosis of the disease becomes a very important event for every person. Modern medicine uses a number of different research methods to diagnose HSV in a patient [4]. These methods are virological methods for the detection and identification of herpes simplex viruses, detection of HSV antigens and enzyme immunoassay, cytomorphological methods, the polymerase chain reaction (PCR) method, the method for registering the immune response to HSV and the method for assessing the immune status.

After diagnosing the virus, it is very important to start treatment in a timely manner and not engage in self-diagnosis and self-medication. Medicines used for herpes infection are effective when prescribed by a doctor in the individual dosage that is

necessary in a particular case. The main class of medicines used in the treatment of herpetic infection is antiviral agents. Both tablets and injections, as well as ointments, creams for local action are used. To prevent relapses, immunostimulating drugs are prescribed to restore and maintain the immune system.

1. World Health Organization [Internet resource] https://www.who.int/news-room/fact-sheets/detail/herpes-simplex-virus (Accessed: 14.02.2023)
2. Isakov V.A., Arkhipova E.I., Isakov D.V. Gerpesvirusnye infektsii cheloveka. Rukovodstvo dlya vrachey. SPb.: SpetsLit (2013) (in Russian)
3. Mardanly S.G., Arseneva V.A., Mardanly S.S., Rotanov S.V. The prevalence rate of human herpes viruses among different age populations // Zh. Mikrobiol. (Moscow), No. 2, P. 50—55 (2019)
4. Prostoy gerpes u vzroslykh. Klinicheskie rekomendatsii MZ RF. (2014) (in Russian)

РАЗРАБОТКА БИОСЕНСОРА ДЛЯ РЕГИСТРАЦИИ ФОСФОРОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Изможерова К.Д.[1], Крюкова Е.М.[1], Мезенина С.А.[1], Чувашов Р.Д.[1], Баранова А.А.[1], Хохлов К.О.[1], Вербицкий Е.В.[1, 2]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина
[2)] Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского Уральского отделения Российской академии наук
E-mail: kira.n@list.ru

FLUORESCENT BIOSENSOR FOR THE REGISTRATION OF ORGANOPHOSPHORUS COMPOUNDS

Izmojerova K.D.[1], Kriukova E.M.[1], Mezenina S.A.[1], Chuvashov R.D.[1], Baranova A.A.[1], Khokhlov K.O.[1], Verbitskiy E.V.[1, 2]
[1)] Ural Federal University named after the First President of Russia B.N. Yeltsin
[2)] I.Ya. Postovsky Insititute of Organic Synthesis of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences

A melamine sponge and agarose hydrogel biosensor with a pyrimidine-based monomolecular fluorescent probe was made. The organophosphorus pesticide malathion was used as the target analyte. The increase in the fluorescence intensity of the hydrogel upon contact with the analyte was recorded visually.

Фосфорорганические соединения (ФОС) используются для борьбы с сельскохозяйственными вредителями во всем мире, их общий вклад составляет около 38% от общего объёма применяемых пестицидов [1]. Накопление ФОС в организме человека вредно, а в больших дозах может быть опасно. Основным токсическим эффектом является ингибирование активности фермента ацетилхолинэстеразы, необходимого для функционирования центральной нервной системы [2,3]. В связи с этим, первоочередной задачей является разработка удобного, быстрого и надежного способа обнаружения ФОС. Флуоресцентный метод имеет большой потенциал для проведения анализа «на месте». Электрон-донорные пестициды при контакте с молекулами флуорофора способны увеличивать яркость флуоресценции, что возможно зарегистрировать даже невооруженным глазом.

Известно применение допированных флуоресцентными пробами гидрогелей в качестве носимых тест-наборов для поиска пестицидов в водных растворах и на поверхностях сельскохозяйственной продукции [4].

В данной работе предложен флуоресцентный материал для детектирования ФОС, использующий мономолекулярный флуоресцентный сенсорный материал на основе пиримидина [5]. В качестве регистрируемого вещества (аналита) использован коммерчески доступный пестицид «Фуфанон-нова», действующим

веществом которого является малатион. Описано изготовление каркаса сенсорного материала из физически сшитого агарозного гидрогеля, высаженного на субстрат из меламин-формальдегидной пены (далее меламин). Измерено изменение яркости свечения в зависимости от концентрации аналита в водном растворе и оценены пределы обнаружения метода. Качественно увеличение яркости свечения образцов можно зарегистрировать визуально (Рис. 1), а количественно – с помощью портативного анализатора флуоресценции. Последний представляет собой малогабаритную веб-камеру, для записи величин яркостей массива флуоресцентных материалов. Результаты демонстрируют потенциал экспресс-детектирования ФОС данным методом.

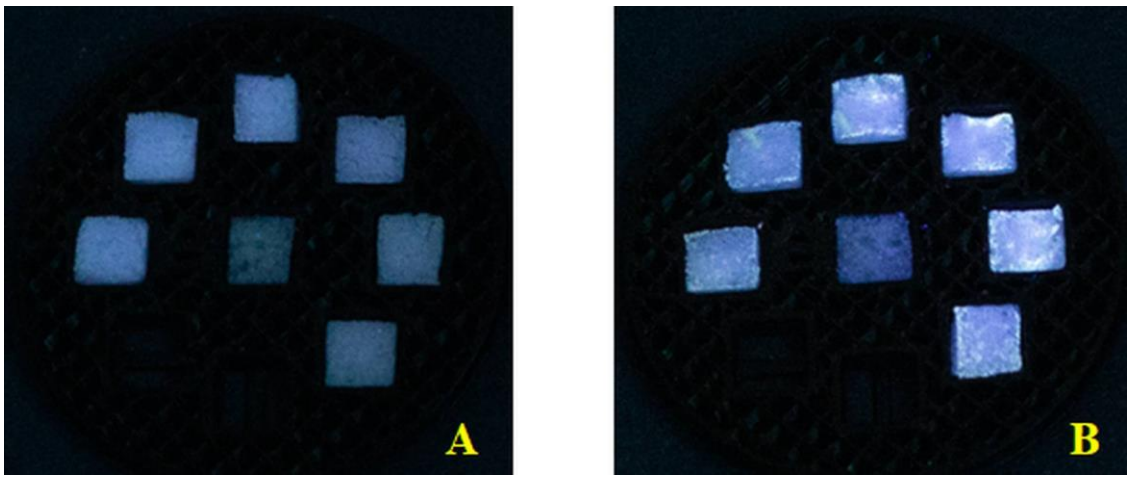


Рис. 1. Фотографии сенсоров: A – До добавления раствора пестицида. B – После добавления раствора пестицида. В обоих случаях центральный образец не содержит сенсорного материала, остальные образцы содержат: меламин, агарозный гидрогель и сенсорный материал.

1. Singh B. K. Nature Reviews Microbiology 7,156 (2009).
2. Chapalamadugu S., Chaudhry G. R. Critical reviews in biotechnology 12, 357 (1992).
3. Pohanka M., Musilek K., Kuca K. Current Medicinal Chemistry 16, 1709 (2009).
4. Xu X. Y., Yan B., Lian X. Nanoscale 10, 13722 (2018).
5. Verbitskiy E. V. et al. Analytical and bioanalytical chemistry 408, 4093 (2016).

FUNCTIONAL PROPERTIES OF OVEN AND VACUUM DRIED CHLORELLA VULGARIS PROTEIN ISOLATES

Kambele J.[1], Okechukwu Q.N.[1], Kovaleva E.G.[1]
[1)] Institute of Chemical Engineering, Ural Federal University. Ekaterinburg, Russia
E-mail: jonaskambele@gmail.com

The functional properties of protein isolates provide clues about their performance in food systems. The results of functional properties serve as a guide regarding the types of food or feed that can be supplemented with the particular protein isolates.

Chlorella vulgaris is one of the most famous eukaryotic microalgae of the microalgal biodiversity and has existed on the earth for more than 2.5 billion years [1]. Chlorella spp. has high protein content amounting to nearly 50% dry weight. Chlorella vulgaris total protein content is about 42–58% of biomass dry weight [2], and the content may vary depending on the conditions under which it was grown.

Protein isolates are refined form of proteins containing the greater amount of proteins which have recently emerged as food fortifiers, to supplement protein deficiency in certain foods [3]. The current works aimed at extracting protein isolates from Chlorella vulgaris and dry them in the oven at and under vacuum at 50oC, and ultimately analyze their functional properties. Protein isolates were isolated from C. vulgaris using isoelectric precipitation method using 2M sodium hydroxide solution and 1M hydrochloric acid.

Oven dried protein isolates had the lowest water absorption capacity (WAC) of 0.07±2.2 ml H2O/g as compared with that of vacuum dried protein isolate whose value was 0.16±0.8 ml H2O/g. Similarly, oven dried samples oil adsorption capacity was found to be lower at 0.55±0.4ml/g than that for vacuum dried sample at 0.59±1.1ml/g. Foaming capacity and stability of the protein isolates was analysed at the natural pH 7 of the samples. Both oven dried and vacuum dried protein isolates showed same foaming capacity at 80%. Foaming stability of the isolates was significantly different from each but generally decreased with time. Vacuum dried isolates had high foam stability from 5minutes through 120 minutes, recording 15.79±0.5% at 120 minutes. Oven dried samples on the other hand had low foam stability and was found to be 7.89%±0.3 at 120 minutes.

Emulsifying activity index of the isolates was examined at pH 7. Oven dried protein isolates had lower emulsifying activity index (0.267±0.04m2/g) than vacuum dried isolates (0.542±0.002 m2/g). On the other hand, oven dried isolates displayed higher emulsifying activity index (79.99±2.5min) than vacuum dried isolates (47.13±1.2min).

The quantity of polyphenols in the protein isolates was determined by using a Gallic acid calibration curve. The results of the polyphenols content in the isolates were expressed mg/g Gallic acid equivalent (mgGAE/g). Oven dried protein isolates had lower polyphenol content (34.3±2.5mgGAE/g) than vacuum dried protein isolates that had a slightly higher value (37.93258±4.8mgGAE/g). The content of flavonoids in the

isolates was determined in the same way but using quercetin as a standard. Results of flavonoid content were expressed as mg/g Quercetin equivalent (mgQE/g). Flavonoid content was slightly higher in vacuum.

1. Safi, C., Zebib, B., Merah, O., Pontalier, P. Y., & Vaca-Garcia, C. (2014). Morphology, composition, production, processing and applications of Chlorella vulgaris: A review. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 35, 265-278.
2. Morris H.J, Almarales A, Carrillo O, Bermudez R.C. Utilisation of Chlorella vulgaris cell biomass for the production of enzymatic protein hydrolysates. Bioresource Technoljgy 2008; 99:7723–9.
3. Elsohaimy, S. A., Refaay, T. M., & Zaytoun, M. A. M. (2015). Physicochemical and functional properties of quinoa protein isolate. Annals of Agricultural Sciences, 60(2), 297-305.

ОБОЛОЧЕЧНАЯ МОДЕЛЬ МЕХАНИЧЕСКОГО КОНТАКТА СКЛЕРА-СЕТЧАТКА В РАМКАХ МЕТОДА КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

Бунтов Е.А.[1, 2], Кокусов И.И.[1], Соловьева С.Н.[1, 2]
[1)] Физико-технологический институт, Уральский Федеральный Университет, Екатеринбург, Россия
[2)] НИЦ Авантренд, Екатеринбург, Россия
E-mail: e.a.buntov@urfu.ru

SHELL MODEL OF MECHANICAL SCLERA-RETINA CONTACT IN THE FRAMEWORK OF THE FINITE ELEMENT METHOD

Buntov E.A.[1, 2], Kokusov I.I.[1], Solovieva S.N.[1, 2]
[1)] Institute of Physics and Technology, Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia
[2)] SRC Avantrend, Ekaterinburg, Russia

During the project, a review of mathematical models and methods describing the mechanical behavior of the propagation of human retinal detachment was carried out. A Python program has been developed that implements a finite element shell model of the human eye for modeling retinal detachment.

Отслоение сетчатки (ОС) возникает, когда нейросенсорная сетчатка отделяется от пигментного эпителия сетчатки (ПЭС) и пространство, образовавшееся между этими двумя слоями, заполняется жидкостью. ОС можно разделить на три категории: (1) регматогенное (RRD), (2) экссудативное (ERD) и (3) тракционное [1].

Оперативное лечение отслоения сетчатки предполагает установку пломбы или упругой ленты на поверхность глаза для создания дополнительных механических напряжений, соединяющих слои сетчатки и склеры. Проблемой является неконтролируемое наступление слепоты у пациентов в первый год после операции. Причины негативных явлений повторного отслоения сетчатки могут быть установлены в ходе моделирования методами конечно-элементного анализа (МКЭ).

Обзор МКЭ глаза показывает, что в литературе мало используются механические характеристики тканей глаза человека. За исключением исследования [10], большинство исследователей используют очень упрощенные модели.

В настоящей работе для реализации математической модели глаза модели в виде приложения, основанного на открытых компонентах, выбран язык программирования Python в сочетании с C-библиотекой GetFEM, имеющей интерфейс для управления на Python. Модель генерируется полностью из исходного кода. В состав модели включены следующие оболочки (в последовательности от центра ко внешним слоям):

1. Стекловидное тело;

2. Сетчатка – сферическая эластичная оболочка конечной толщины, плотно прилегающая к стекловидному телу;

3. Склера – сферическая эластичная оболочка конечной толщины, плотно прилегающая к сетчатке;

4. Циркляж – эластичное кольцо тороидальной формы, плотно прилегающее к склере.

Исходные механические параметры биологических материалов взяты из литературных данных [1] . Характеристики циркляжа будут получены из экспериментов по механическому растяжению. Все геометрические параметры и механические характеристики модели могут быть настроены для проведения расчетов в каждом индивидуальном случае. Пример построенной модели с сеткой конечных элементов приведен на рисунке.

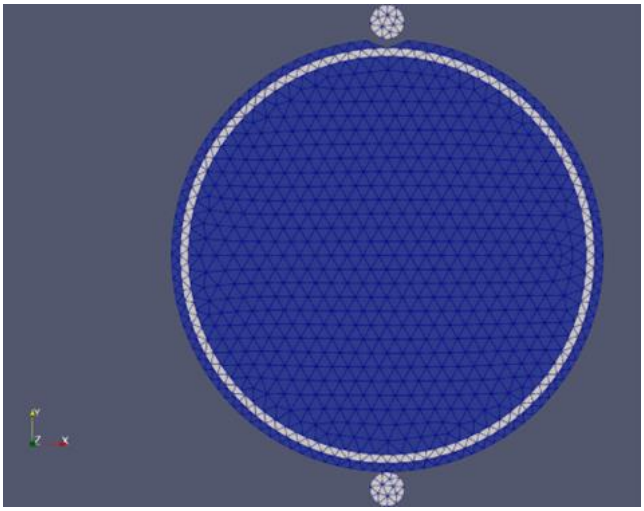


Рис. 1. Геометрическая структура среза оболочечной модели глаза

В рамках конечно-элементной модели каждый слой имеет собственную сетку, скользящие контакты между слоями описываются индивидуальными коэффициентами трения и сформированы с использованием технологии трассировки лучей.

Опорой глазного яблока является задняя стенка склеры. В качестве граничного условия для задней стенки выбрано условие Дирихле ее неподвижности. Деформация глазного яблока происходит под действием сжимающих напряжений со стороны циркляжа.

1. A. Karimia, R. Razaghib, T. Seraa, S. Kudoa. A combination of the finite element analysis and experimental indentation via the cornea. Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials 90 (2019) 146–154
2. J. M. Lakawicz, W. J. Bottega, J. L. Prenner, and H. F. Fine. An analysis of the mechanical behaviour of a detached retina. Math. Med. Biol., 32:137–161, 2015.

О ДЕФОРМАЦИОННОМ ПОВЕДЕНИИ БИОМИНЕРАЛА (СКОРЛУПЫ ПТИЧЬИХ ЯИЦ) И МАТЕРИАЛОВ НА ЕГО ОСНОВЕ

Коровин Р.Д.[1], Меженов М.Е.[1], Кабанова А.Н.[1], Мещерягина С.Г.[2], Зайцев Д.В.[1], Панфилов П.[1]
[1)] Институт естественных наук и математики, Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина
[2)] Институт экологии растений и животных УрО РАН
E-mail: roman_korovin2018@mail.ru

ON DEFORMATION BEHAVIOR OF THE BIOMINERAL (HEN'S EGGSHELL) AND EGGSHELL-BASED MATERIALS

Korovin R.D.[1], Mezhenov M.Ye.[1], Kabanova A.N.[1], Mecheryagina S.G.[2], Zaytsev D.[1], Panfilov P.[1]
[1)] Institute of natural sciences and mathematics, Ural Federal University named after the First President of Russia B.N. Yeltsin
[2)] Institute of Plant and Animal Ecology, UB RAS

The report considers the deformation behavior of laboratory samples cut from the shell of bird eggs (chicken and some species of wild birds of the Ural region) and prepared from grinded hen's shell by compaction.

В докладе рассмотрено деформационное поведение лабораторных образцов, вырезанных из скорлупы птичьих яиц (курица и некоторые виды диких птиц региона Урала) и приготовленных из измельченной куриной скорлупы методом компактирования. Скорлупа птичьих яиц представляет собой твердую ткань, на 95% состоящую из карбоната кальция биологического происхождения и 5% биоорганических соединений. Экспериментальный материал был либо куплен в городских супермаркетах (куриные яйца), либо предоставлен сотрудниками ИЭРЖ УрО РАН (яйца диких птиц).

Образцы из скорлупы вырезали при помощи дисковой алмазной пилы вдоль главной оси яйца шириной 2 мм и длиной 10–15 мм, толщина образцов зависела от толщины скорлупы и менялась в зависимости от вида птицы от 0,5 мм до 1,5 мм. На часть образцов из куриной скорлупы нанесли различные виды полимерного пломбного материала. Из порошка куриной скорлупы прессовали образцы в форме цилиндров диаметром 10 мм и соотношением диаметра к высоте 1:2; 1:1; 3:1 либо без связующего, либо со связующим в виде полимерного клея БФ6. Образцы, вырезанные из скорлупы яиц, деформировали по схемам 3-х точечного изгиба и среза на воздухе и в воде. Компактированные образцы испытывали на воздухе по схемам одноосного сжатия и диаметрального сжатия. До и после испытаний боковые поверхности образцов документировали при помощи световых микроскопов. Поверхности изломов образцов из скорлупы изучали на сканирующем электронном микроскопе. Также было проведено

исследование роста трещин в образцах из скорлупы при изгибе непосредственно на оптическом микроскопе.

Показано, что при минимальном уровне растягивающих нагрузок (одноосное сжатие и срез) модельные материалы на макроскопическом масштабе демонстрируют вязкоупругое деформационное поведение, как на воздухе, так и в воде. В случае приложения к образцу растягивающих нагрузок, все модельные материалы вели себя хрупко на макроскопическом масштабе. При этом трещины, по росту которых можно получить информацию о деформационном поведении материала на микроскопическом масштабе, показывали вязкоупругое поведение. Так при изгибе трещины в скорлупе можно было подрастить, увеличивая стрелу прогиба. На основании полученных результатов было сделано заключение: (1) характер деформационного поведения биоминерала – скорлупы птичьих яиц на макроскопическом уровне определяется долей растягивающих напряжений в схеме нагружения и меняется от хрупкого при изгибе и диаметральном сжатии до вязкоупругого при одноосном сжатии и срезе; (2) на микроскопическом масштабе, поведение всех модельных материалов было аттестовано как вязкоупругое при всех схемах нагружения; (3) влияние водной среды не приводит к качественным изменениям в деформационном поведении модельных материалов, независимо от их генезиса.

Работа выполнена при поддержке РНФ (грант № 23-29-00253).

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК АГАРОЗНОГО ГИДРОГЕЛЯ В КАЧЕСТВЕ КАРКАСА ДЛЯ ФЛУОРЕСЦЕНТНОГО БИОСЕНСОРА

Крюкова Е.М.[1], Мезенина С.А.[1], Изможерова К.Д.[1], Чувашов Р.Д.[1], Баранова А.А.[1], Хохлов К.О.[1], Вербицкий Е.В.[1, 2]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
[2)] Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского Уральского отделения Российской академии наук, Екатеринбург, Россия
E-mail: Kriukova.Elena@urfu.me

SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF AGAROSE HYDROGEL AS A FRAMEWORK FOR A FLUORESCENT BIOSENSOR

Kriukova E.M.[1], Mezenina S.A.[1], Izmojerova K.D.[1], Chuvashov R.D.[1], Baranova A.A.[1], Khokhlov K.O.[1], Verbitskiy E.V.[1, 2]
[1)] Ural Federal University named after the First President of Russia B.N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia
[2)] I.Ya. Postovsky Insititute of Organic Synthesis of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia

In this work, a method for the synthesis of agarose hydrogel for use as a biosensor framework has been proposed. The characteristics of the gel that are most suitable for the fabrication of layers used as a sensor backbone are determined.

Возрастающие загрязнения окружающей среды токсическими соединениями техногенной природы выводят в первоочередные задачи экологии разработку чувствительных, простых и недорогих методов оценки экотоксикантов, накапливающихся в почве, воде, растениях и продуктах питания. В связи с этим в последние годы целью ряда исследований становится разработка биосенсорных методов для оценки воздействия токсикантов. Большое разнообразие современных конструкций биосенсоров основано на использовании широкого формата аналитических и технологических стратегий выявления различных регуляторных и функциональных молекулярных маркеров.

В данной работе описана простая и недорогая конструкция флуоресцентного биосенсора для обнаружения и измерения концентрации пестицидов. Данный биосенсор содержит индикатор - флуорофор на основе пиримидина [1] и каркасную часть, состоящую из гидрофильной полимерной сети, которая поглощает воду, превышающую их собственный вес в несколько раз (от 0,1 до 1000) [2].

Изготавливаемый гидрогель создан на основе дистиллированной воды и порошка агар-агар (прочность желирования 900 bloom). Для улучшения гибкости, прозрачности и устойчивости к механическим повреждениям каркаса

использовался физический метод сшивки гидрогелей. Субстрат кипятили, а в последствии замораживали до температуры -18 ºС, циклы кипячения-замораживания повторяли от 2 до 8 раз. Далее внедряли флуорофор и заливали в форму, где оставляли до полного высыхания, порядка нескольких дней.

Для исследования характеристик были отлиты и высушены тонкие и толстые пленки толщиной, соответственно, 1,5 и 5 мм. При изготовлении использовались гидрогели различной концентрации: от 3% до 4,5% с шагом 0,5%. Оценка оптической плотности полученных образцов (рисунок 1) показала, что оптическая плотность пленок не превышает десятой доли от максимума поглощения, что свидетельствует об удовлетворяющей прозрачности каркаса, и минимизации шумовых помех при регистрации сигнала с сенсора.

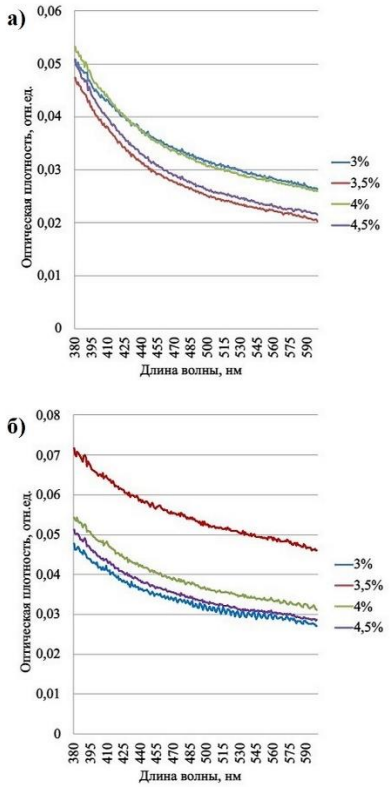


Рис. 1. Зависимость оптической плотности от концентрации раствора агар-агара в диапазоне видимого света для толстых пленок – а); для тонких пленок – б).

Дальнейшее исследование направленно на тестирование сенсора в реальных условиях. В качестве аналита будет использовано фосфорсодержащее соединение на основе малатиона ($C_{10}H_{19}O_6PS_2$) с коммерческим названием «Фуфанон-Нова», данный пестицид широко используется в сельском хозяйстве.

1. Verbitskiy E. V. et al. Analytical and Bioanalytical Chemistry 408, 4093 (2016).
2. Hoffman A.S. Advanced Drug Delivery Reviews 54, 3 (2002).

ВЛИЯНИЕ ИОНИЗИРУЮЩЕГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА СВОЙСТВА КАРТОФЕЛЬНОГО И КУКУРУЗНОГО КРАХМАЛА

Крылова Д.А.[1], Косульникова С.А.[1], Бажукова И.Н.[1]
[1)] Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия
E-mail: krylovadaryayugorsk@yandex.ru

THE EFFECT OF IONIZING RADIATION ON THE POTATO AND CORN STARCH

Krylova D.A.[1], Kosyulnikova S.A.[1], Bazhukova I.N.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The research is devoted to evaluating the response of potato and corn starch to the ionizing radiation in a wide range of doses. The effect of ionizing radiation on changing the starch granule structure was demonstrated.

Потери сельскохозяйственных продуктов питания при хранении составляют до 30–50 %, что делает актуальными вопросы увеличения сохранности их продовольственного фонда. Для снижения подобных потерь в ряде стран применяют химические ингибиторы, основной из них хлорпрофам. Однако он обладает большим недостатком: распадается на производные на основе анилина, которые имеют высокий профиль токсичности. В ЕС 1 января 2020 был принят закон о запрете хлорпрофама. Конкурентоспособным аналогом химическим ингибиторам является радиационная обработка.

Крахмал является одним из наиболее распространённых углеводов в рационе человека и содержится во многих основных продуктах питания. Крахмал является основной единицей массы картофеля и кукурузы, поэтому мы используем его в качестве биомаркера физиологического состояния этих овощей после воздействия ионизирующего излучения. Кроме того, известно, что нативный крахмал плохо растворяется в холодной воде. Повышенной растворимостью обладают модифицированные крахмалы, в том числе окисленные, вследствие чего они широко востребованы в стройиндустрии, целлюлозно-бумажной, текстильной и особенно пищевой промышленности.

В настоящей работе использовали образцы картофельного и кукурузного крахмала, полученные непосредственно из овощей и изготовленные промышленным способом. Облучение образцов проводили в ИВЦ Радиационной стерилизации (УрФУ) с использованием линейного ускорителя электронов УЭЛР-10-10С (Е=10 МэВ, I до 1 мА). Облучение производилось в диапазоне доз 10–900 кГр.

Образцы крахмала, полученного непосредственно из картофеля и кукурузы, были облучены дозами 10кГр. На картофеле, который подвергся дозе 10 кГр, при разрезании были обнаружены черные пятна, что свидетельствует о

радиационном ожоге растительных тканей. Образцы кукурузного и картофельного крахмала, изготовленные промышленным способом, были облучены дозой 900 кГр. В результате воздействия картофельный крахмал приобрел желтоватый цвет. Также было замечено, что произошла деструкция оберточной бумаги, в которую был помещен образец крахмала.

Исследование повреждения гранул крахмала в результате воздействия ионизирующим излучением производилась методом микроскопирования. Показано, что при воздействии ионизирующего изучения гранулы крахмала увеличиваются и растрескиваются, что аналогично разбуханию высокомолекулярных соединений при термическом воздействии. При облучении крахмала крайне высокими дозами (~900 кГр) происходит разрушение гранул крахмала. Оценка растворимости образцов крахмала в воде показывает, что гидролиз облученного крахмала на несколько порядков выше, чем необлученного, что связано с разрушением гранул крахмала.

Авторы выражают благодарность сотрудникам ИВЦ Радиационной стерилизации за помощь в проведении экспериментальной части работы.

1. Шишонок М.В., Литвяк В.В., Мурашко Е. А., Гринюк Е.В., Сальников Л.И., Рогинец Л.П., Круль Леонид Петрович Структура и свойства картофельного крахмала, облученного ускоренными электронами

АНТИБАКТЕРИАЛЬНАЯ АКТИВНОСТЬ УГЛЕРОДСОДЕРЖАЩИХ ПОКРЫТИЙ

Лапина П.К.[1], Городничий Е.К.[1], Бажукова И.Н.[1], Викторов Л.В.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
E-mail: pln.lpn99@gmail.com

ANTIBACTERIAL ACTIVITY OF CARBON-CONTAINING COATINGS

Lapina P.K.[1], Gorodnichiy E.K.[1], Bazhukova I.N.[1], Viktorov L.V.[1]
[1)] Ural Federal University named after the first president of Russia B.N. Eltsin, Yekaterinburg, Russia

The surface biological effect of nanocarbon coatings, which can be used in the clinical practice of implantology due to their unique properties, has been studied.

В современном мире проблема производственного травматизма особенно актуальна в связи с тенденцией к увеличению числа случаев травм с летальным исходом по данным официальной статистики Росстата. Высокие абсолютные показатели производственного травматизма являются медико-социальной проблемой общества: снижение функциональности организма ведет к экономическим потерям вследствие инвалидизации работоспособной части общества и преждевременной смертности. Прогрессивное развитие медицинских технологий в настоящее время обеспечивает возможность восстановления утраченных функций посредством вживления качественных имплантатов, материалы которых обладают прочностью, коррозионной стойкостью и биологической инертностью. Изучение свойств таких материалов, помещенных в биологическую среду, является важной задачей, поставленной перед материаловедением сегодня с целью повышения качества жизни населения. Одной из основных проблем данной области исследований является риск возникновения бактериального инфицирования, предотвращение которого возможно при извлечении контаминированного импланта [1]. Таким образом для повышения эффективности данного метода лечения необходимо изучение физико-химических свойств материалов, проявляющих способность к предотвращению формирования микробных биопленок на их поверхности. Одним из возможных способов решения указанной проблемы является создание антибактериальных покрытий на поверхности имплантов. Так, в частности, исследования по применению углеродсодержащих материалов в качестве антибактериальных агентов продемонстрировали их большой потенциал для лечения инфекционных заболеваний [2].

В настоящей работе исследовались антибактериальные свойства углеродных алмазоподобных покрытий. В качестве подложек были использованы титановые

пластины площадью 0,6 см^2 с углеродсодержащим покрытием различного состава, синтезированными методом ионно-плазменного напыления на установке УВНИПА-1-001. Антибактериальные свойства выбранных материалов оценивались с помощью люминесцентного бактериального теста Биосенсор Эколюм-10. Препарат представляет собой лиофилизированный рекомбинантный штамм Escherichia coli K12 TG1 (pF1) со встроенной кассетой luxCDABE-генов V. fischeri МГУ-6 из коллекции Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова.

Биолюминесценция бактерий штамма Escherichia coli K12 TG1 линейно соотносится с колониеобразующей способностью бактерий. Результаты исследования показывают, что биолюминесценция контрольного образца сохраняется в течение гораздо более длительного времени. В то же время интенсивность биолюминесценции образца, инкубированного вместе с углеродсодержащими материалами, заметно снижена. Таким образом, оценка биотоксичности исследуемых образцов позволяет сделать вывод, что углеродсодержащие материалы вызывают развивающееся во времени ингибирование свечения, т. е. проявляют токсический эффект для бактериального штамма Escherichia coli.

1. Infections associated with medical devices / C. Von eiff [et al.] // Drugs. — 2005. — Vol. 65. — P. 179–214.
2. Beyth N. et al. Alternative antimicrobial approach: nano-antimicrobial materials //Evidence-based complementary and alternative medicine. – 2015. – Т. 2015.

РАЗРАБОТКА МЕТОДИКИ ВЫДЕЛЕНИЯ ПЕРИТУБУЛЯРНЫХ МИОДНЫХ КЛЕТОК ИЗ СЕМЕННИКОВ КРЫСЫ С ЦЕЛЬЮ ПОЛУЧЕНИЯ ПЕРВИЧНОЙ КУЛЬТУРЫ

Лейберова А.К.[1, 2], Хрипкова В.В.[1], Храмцова Ю.С.[1, 2]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт иммунологии и физиологии Уральского отделения Российской академии наук (ИИФ УрО РАН), г. Екатеринбург, Россия
E-mail: anna.leyberova@list.ru

DEVELOPMENT OF A TECHNIQUE FOR ISOLATING PERITUBULAR MYOID CELLS FROM THE RAT TESTIS IN ORDER TO OBTAIN A PRIMARY CULTURE

Leiberova A.K.[1, 2], Khripkova V.V.[1], Khramtsova Y.S.[1, 2]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia
[2)] Institute of Immunology and Physiology of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences (IIF UB RAS), Yekaterinburg, Russia

A technique for obtaining a primary cell culture of the peritubular myoid cells has been developed and information has been obtained on the features of its cultivation under specialized conditions to create an experimental model.

Актуальность. На сегодня известно, что перитубулярные миодные клетки (ПМК) кроме обеспечения структурной целостности канальцев семенника и выполнения регуляции движения сперматозоидов, вовлечены и в другие важные процессы, включая паракринную регуляцию сперматогониальных стволовых клеток и влияние на функцию клеток Сертоли и Лейдига. Использование первичных культур клеток семенника в качестве экспериментальной модели может помочь расширить представления о взаимодействии клеток семенного канальца друг с другом. Однако, получение первичных культур, содержащих один тип клеток, связано с рядом сложностей, требующих своего решения.

Цель. Разработать методику выделения ПМК из канальцев семенника для получения первичной культуры.

Материалы и методы. ПМК получали из семенников крыс линии Wistar, возрастом 8 (3 самца) и 3 месяца (4 самца). В стерильных условиях извлекали семенники, их обеззараживали, промывали фосфатным буфером (PBS) в чашке Петри, удаляли капсулу, подвергали разным способам механической и ферментативной дезагрегации. Суспензию фильтровали (сито 100 мкм). Центрифугировали, используя разные режимы. Супернатант сливали, к осадку добавляли питательную среду. Культивировали клетки в культуральном флаконе с обработанной поверхностью. Инкубировали в CO_2 термостате (37 °C и 5%

CO_2). Считали клетки в камере Горяева. Идентифицировали окрашиванием микропрепаратов гематоксилином-эозином и толуидиновым синим, проводили ИГХ-анализ с использованием антител к гладкомышечному актину. Жизнеспособность клеток оценивали МТТ-тестом при каждой генерации с последующим пассажем. Субкультивирование проводилось при формировании монослоя из ПМК. Номера пассажей записывали.

Результаты. При разработке методики выделения ПМК из семенников крысы выделены наиболее успешные манипуляции, приведшие к положительному результату: ферментация: 1 этап – трипсин-ДНКаза (0,25 мг/мл и 1 мкг/мл) 15 минут, 37 °С, 2 этап – коллагеназа-ДНКаза (1 мг/мл и 1 мкг/мл) 15 минут, 37 °С; центрифугирование 5 минут, 400 g; в фильтрации через сито нет необходимости; определен состав питательной среды для культивирования ПМК: RPMI, 10% FBS, 1% антибиотика. Первичную культуру ПМК удалось получить из образцов семенников 3-месячных крыс (культивировать ПМК из семенников 8-месячных крыс не удалось). ПМК самостоятельно адгезировались на 3 сутки. От клеток сперматогенного ряда культура была отмыта к 4 суткам, а получение чистой линии ПМК пришлось на 7 сутки, в тот день когда было выполнено первое пассирование. Субкультура первая насчитывала 2 млн клеток, вторая (11 сутки) – 3,5 млн, третья (18 сутки) – 2,5 млн.

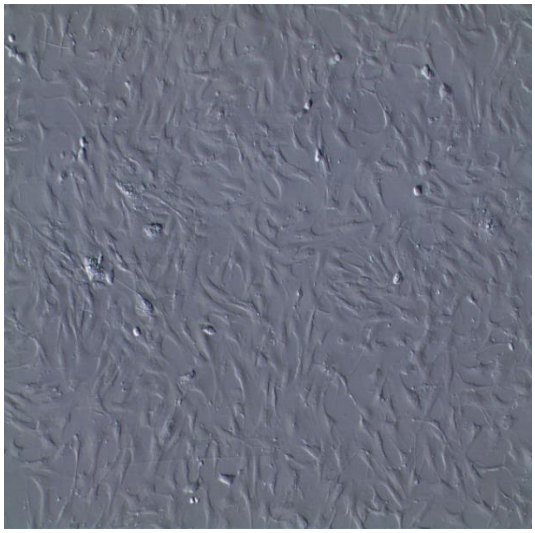


Рис. 1. Первичная культура перитубулярных миодных клеток канальцев семенника крысы, 7 сутки. Увеличение объектива 10Х.

Заключение. Разработка методики выделения ПМК из семенников крысы, получения первичной культуры ПМК, ее оценка, повторные отработки методики проводились в течение 10 месяцев. Полученная культура ПМК семенника является первичной нормальной монослойной культурой, переходящей с первым пассажем на 7 сутки в клеточную линию, которую можно использовать в дальнейших исследованиях.

МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СКЛЕРОЗИРОВАННОГО ДЕНТИНА

Лоскутников Е.В.[2], Куклина А.А.[1, 2], Зайцев Д.В.[1, 2]
[1)] Уральский государственный горный университет
[2)] Уральский Федеральный Университет
E-mail: gtx70@mail.ru

MECHANICAL PROPERTIES OF SCLEROSED DENTIN

Loskutnikov E.[2], Kuklina A. A.[1, 2], Zaytsev D.[1, 2]
[1)] Ural State Mining University
[2)] Ural Federal University

A study of the microstructure and hardness of age-related dentin were carried out. The composition of age-related dentin was studied by mass spectrometry. The behavior of age-related dentin during exercise was determined. The content of mineral deposits in age-related dentin was determined.

Механические свойства дентина зубов человека меняются с возрастом, что может влиять на специфику проведения процедуры при возмещении твёрдой ткани зуба. Целью данной работы стало оценка изменений в механических характеристиках, микроструктуры и соотношении минеральной и органической фазы в дентине, связанных с процессами старения. Результатом работы стали: оценка поведения возрастного и нормального дентина при нагрузке как биологического, композитного материала, создание теоретической базы для реставрации твёрдой ткани зуба у людей пожилого возраста.

Для подготовки образцов (распиловки) использовалась алмазная пила с водным охлаждением. Поверхности реза обрабатывались с помощью полировального станка с вращающимся алмазным диском при водном охлаждении. Для изучения микроструктуры образца использовался оптический и сканирующий электронный микроскоп. Для определения содержания микроэлементов в образцах использовался метод масс-спектрометрии с индуктивно-связанной плазмой после кислотного вскрытия в блоке чистых помещений (6, 7 классы чистоты) ИГГ УрО РАН. Микроиндентирование по Виккерсу склерозированного и нормального дентина проводили на ПМТ-3.

Видимым изменением возрастного дентина является его прозрачность. Этот эффект возникает в связи с закрытием дентинных каналов минеральными отложениями, и как следствие уменьшение количества рассеянного света [1]. Такие изменения могут наблюдаться от корня зуба в плоть до коронковой части. Исследования показывают, что эти минеральные образования естественны как для возрастного так и для нормального дентина, то есть не содержат новых соединений. По результатам исследования прочностных характеристик можно сделать вывод что склерозированный дентин имеет характеристики допустимые

для проведения реставрации на его основе. Микротвёрдость для нормального дентина составляет Hv = (0,71 ± 0,05) Гпа, для Склерозированного Hv = (0,86 ±0,10) ГПа.). Таким образом можно сказать о возможности протезирования возрастного дентина без заметных осложнений, при использовании совместимых материалов.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ №22-29-00268.

1. J.H. Kinney, R.K. Nalla, J.A. Pople, T.M. Breunig, R.O. Ritchie Age-related transparent root dentin: mineral concentration, crystallite size, and mechanical properties// Biomaterials 26 (2005) 3363–3376

ВЛИЯНИЕ НЕНЬЮТОНОВСКИХ СВОЙСТВ КРОВИ НА ОБРАЗОВАНИЕ РЕЦИРКУЛЯЦИОННЫХ ЗОН В СОСУДАХ СО СТЕНОЗОМ

Махаева К.Е.[1], Соколов С.Ю.[1, 2], Бляхман Ф.А.[1, 2], Стародумов И.О.[1, 2]
[1)] Институт естественных наук и математики, Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия
[2)] Уральский государственный медицинский университет, Екатеринбург, Россия
E-mail: dearksy000xenium304@mail.ru

INFLUENCE OF NON-NEUTONIAN PROPERTIES OF BLOOD ON FORMATION OF RECIRCULATION ZONES IN VESSELS WITH STENOSE

Makhaeva K.E.[1], Sokolov S.Yu.[1, 2], Blyakhman F.A.[1, 2], Starodumov I.O.[1, 2]
[1)] Institute of Natural Sciences and Mathematics, Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia
[2)] Ural State Medical University, Yekaterinburg, Russia

The aim of the work is demonstration the influence of non-Newtonian blood properties on vortex formation. The blood flow characteristic of different phases of the cardiac cycle, vortex zones are formed and flow characteristics quantitatively differ in the area of stenosis by the order of 10%.

В области работ по гемодинамике особое внимание уделяется изучению влияния неньютоновских свойств крови на характеристики ее течения в сосудах со стенозом. Стеноз характеризуется локализованным сужением артерии, которое возникает из-за отложения липопротеинов на внутренних стенках сосуда. Одним из важных последствий кровотока при стенозах является образование рециркуляционных зон непосредственно за местом сужения артерии.

Компьютерное моделирование считается одним из современных и перспективных методов исследования гемодинамики с высокой степенью детализации [1, 2]. Особый интерес представляет возможность использования компьютерных моделей в качестве виртуального экспериментального стенда для оценки гемодинамики в специальных условиях с целью понять процессы, индуцируемые стенозом и влекущие за собой качественные и количественные изменения в функционировании артерии.

Данная работа посвящена изучению влияния неньютоновских свойств крови на образование вихревых зон за местом сужения сосуда. Моделирование кровотока было выполнено с использованием гидродинамической модели Навье-Стокса, а реологические свойства крови были описаны с помощью модели Карро, которая часто используется в задачах моделирования ламинарной гемодинамики [1-3].

Для моделирования гемодинамики рассматривалась 3D модель реальной коронарной артерии, реконструируемой по данным рентгеноконтрастной коронографии.

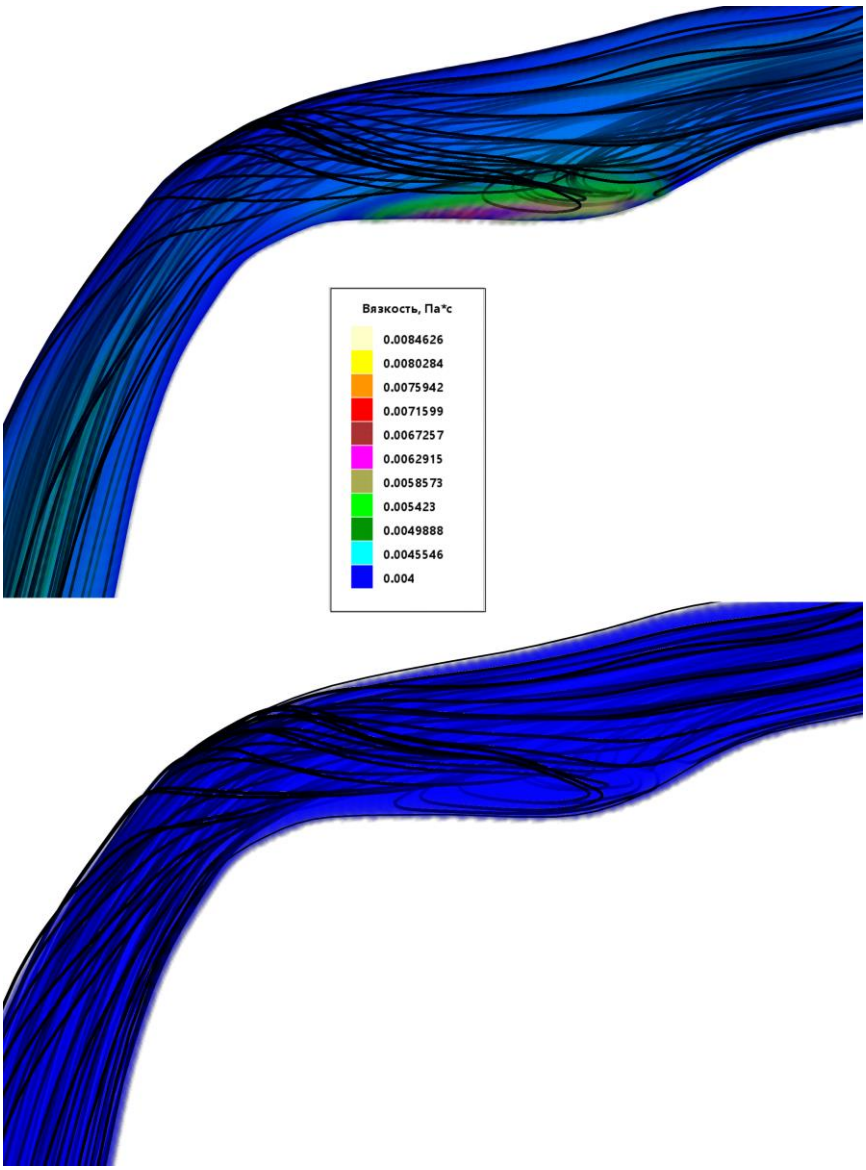


Рис. 1. Линии тока и распределение вязкости в области стеноза сосуда, реконструированного по данным рентгеноконтрастной коронографии, с использованием модели Карро (верхний рисунок) и модели с постоянной вязкостью (нижний рисунок).

В ходе работы было отмечено, что при скоростях гемопотока, характерных для различных фаз сердечного цикла, происходит формирование вихревых рециркуляционных зон.

Процесс устойчиво воспроизводится как для модели крови с постоянной вязкостью, так и с переменной, зависящей от сдвиговых напряжений в среде. Однако, количественно характеристики течения в области стеноза и, в частности,

в рециркуляционных зонах могут отличаться на величину порядка 10%. Данный результат показывает значительное влияние реологических процессов на особенности гемодинамики в коронарных сосудах.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 22-71-10071.

1. Starodumov I. O., Sokolov S. Y., Alexandrov D. V., Zubarev A. Y., Bessonov I. S., Chestukhin V. V., Blyakhman F. A. Modeling of hemodynamics in bifurcation lesions of coronary arteries before and after myocardial revascularization. // Phil. Trans. R. Soc. A. – 2022. – V. 380, № 2217.
2. Mir Golam Rabby, Sumaia Parveen Shupti, Md. Mamun Molla. Pulsatile Non-Newtonian Laminar Blood Flows through Arterial Double Stenoses. // Journal of Fluids. – 2014. – P. 13.
3. Hund S.J., Kameneva M.V., Antaki J.F. A Quasi-Mechanistic Mathematical Representation for Blood Viscosity. // Fluids. – 2017. – V. 2, № 1.

FABRICATION OF FUCOIDAN/CHITOSAN NANOPARTICLES FOR THE CONTROLLED RELEASE OF PIPERINE IN VITRO

Mensah E.O.[1], Mironov M.A.[1]
[1)] Institute of Chemical Technology, Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia
E-mail: emmanuelofosu63@gmail.com

Nanoparticles are novel means of improving the oral bioavailability, controlled release, and protection of most bioactive compounds and drugs. This research article is therefore focused on the formulation of nanoparticle from fucoidan and chitosan for the delivery of piperine in vitro.

Piperine is an alkaloid and the major bioactive compound found in black pepper and long pepper widely endowed with numerous biological activities such as anticancer, antioxidant, anti-inflammatory, cardioprotective, and antidiabetic activity [1]. As a result, piperine has received much attention in the field of pharmaceutical, food and the cosmetic industries for the development of functional products. However, piperine has been faced with challenges such as oral bioavailability and bioaccessibility. Piperine is a hydrophobic compound with a logP value of 2.4 and water solubility of 40 μg/ml which is the major drawback [2].

Therefore, the main aim of this study is to develop a nano-sized polymer (nanoparticle) from fucoidan and chitosan for the delivery of piperine in vitro. Fabrication of the nanoparticles was carried out by the polyelectrolyte assembly method. After formulation of the nanoparticles, the piperine was then loaded into the complex. The piperine loaded nanoparticles were then characterized by dynamic light scattering (DLS), and infrared spectroscopy. The encapsulation efficiency (EE %) and release of the piperine from the nanoparticles were also performed using the UV/Visible spectroscopy.

Results obtained from the infrared spectra indicates a good formulation of nanoparticles with characteristic bands from fucoidan, chitosan, and piperine present in the loaded nanoparticle. In addition, the gel was chemically crosslinked between the fucoidan and chitosan. Also, the nanoparticles obtained had sizes 219±0.61nm and 355.63±14.49nm for the unloaded and loaded nanoparticles respectively. In addition, the nanoparticles had a good surface charge of -17.30±1.07mV and -21.17±0.68mV which indicates a low tendency of aggregation of the nanoparticles. Furthermore, results from the EE % of the nanoparticles proved its ability to encapsulate piperine into matrix. Moreover, the release studies also revealed the significant release of piperine from the nanoparticles as compared to the unformulated piperine in both acidic and neutral media.

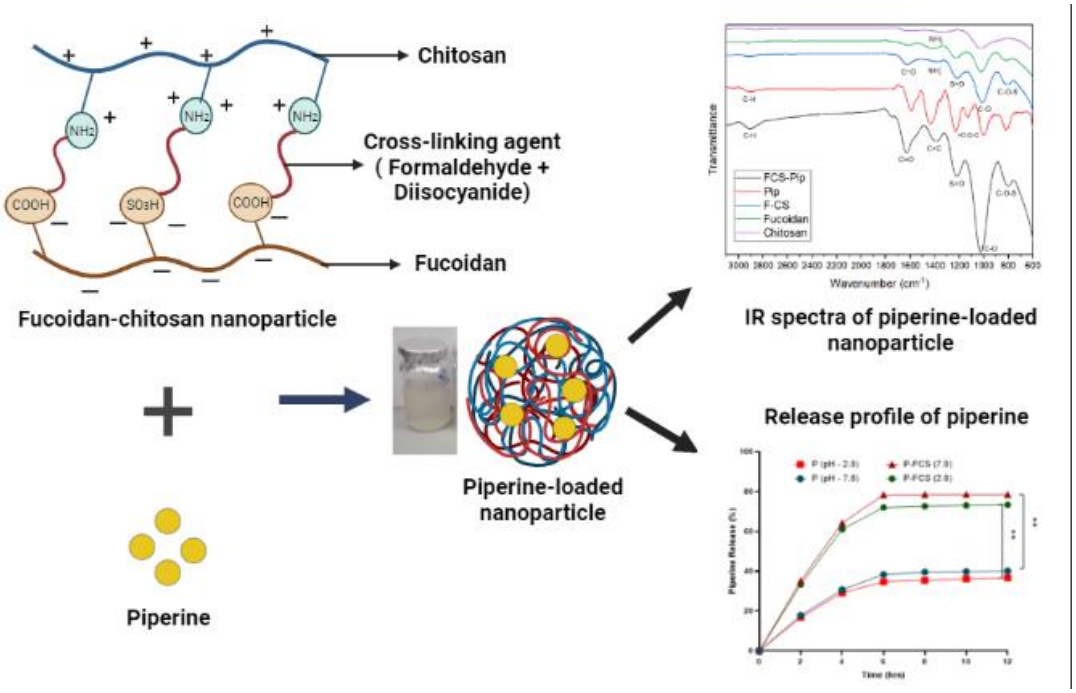


Рис. 1. Graphical abstract of the piperine-loaded nanoparticles.

1. Jaisin, Y., Ratanachamnong, P., Wongsawatkul, O., Watthammawut, A., Malaniyom, K., Natewong, S. (2020). Antioxidant and anti-inflammatory effects of piperine on UV-B-irradiated human HaCaT keratinocyte cells. Life Sciences. 263, 118607. https://doi.org/10.1016/j.lfs.2020.118607
2. Ren, T., Wang, Q., Li, C., Yang, M., Zuo, Z. (2018). Efficient brain uptake of piperine and its pharmacokinetics characterization after oral administration. Xenobiotica 48, 1249-1257.

ВКЛЮЧЕНИЕ МАГНИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ В МЕЗОПОРИСТЫЕ МАТРИЦЫ КАРБОНАТА КАЛЬЦИЯ, ПРЕДНАЗНАЧЕННЫЕ ДЛЯ БИОМЕДИЦИНСКИХ ПРИМЕНЕНИЙ

Михеев А.В.[1], Паллаева Т.Н.[1], Бурмистров И.А.[1], Артемов В.В.[1], Хмеленин Д.Н.[1], Трушина Д.Б.[1, 2]
[1)] ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН, Москва, Россия
[2)] Первый Московский государственный медицинский университет им. И.М. Сеченова Министерства здравоохранения РФ (Сеченовский университет), Москва, Россия
E-mail: mikheev.av16@physics.msu.ru

INCORPORATION OF MAGNETIC NANOPARTICLES INTO MESOPOROUS CALCIUM CARBONATE MATRICES FOR BIOMEDICAL APPLICATIONS

Mikheev A.V.[1], Pallaeva T.N.[1], Burmistrov I.A.[1], Artemov V.V.[1], Khmelenin D.N.[1], Trushina D.B.[1, 2]
[1)] FSRC “Crystallography and Photonics” RAS, Moscow, Russia
[2)] Institute of Molecular Theranostics, Sechenov University, Moscow, Russia

In this work the formation of magnetically sensitive "core-shell" systems based on pre-synthesized vaterite microparticles and iron oxide nanoparticles was studied by two methods: physical sorption of nanoparticles from a suspension at room temperature, as well as freezing-induced loading.

Большое количество исследований в данный момент направлено на разработку композитных частиц, предназначенных для доставки веществ in vivo и применения в диагностике и лечении различных заболеваний. Наноструктурированные системы «ядро-оболочка», сочетающие в себе свойства различных компонентов, представляют особый интерес благодаря их универсальности и возможности применения в области биомедицинских технологий. Использование микрочастиц карбоната кальция в полиморфной модификации ватерита в качестве ядра обусловлено их биосовместимостью, значительной пористостью и возможностью биодеградации в физиологических условиях, что позволяет использовать их как для эффективной загрузки препаратов, так и для контролируемого высвобождения инкапсулированных молекул. Гибридные системы «карбонат кальция - оксид железа», в которых оболочка представлена магнитными наночастицами (МНЧ) оксидов железа, объединяют в себе возможности высокоёмких контейнеров для инкапсулирования терапевтических и диагностических веществ с чувствительностью к магнитному полю [1].

Основными методами формирования оболочки на мезопористых матрицах карбоната кальция являются физическая сорбция из суспензии при комнатной температуре и заморозка растворителя. В первом случае включение происходит

в результате самопроизвольного процесса физической сорбции при увеличении концентрации МНЧ у поверхности частиц. При загрузке, индуцированной заморозкой растворителя, нанообъекты выталкиваются фронтом кристаллизации из дисперсионной среды и концентрируются около поверхности микрочастиц карбоната кальция, после чего фронт «вдавливает» МНЧ в поры $CaCO_3$ [2]. Преимуществами загрузки методом заморозки растворителя, является высокая эффективность загрузки МНЧ в поры карбоната кальция по сравнению с физической сорбцией и возможность многократного повторения процесса для последовательного увеличения массового процента включенных частиц.

В рамках данного исследования синтезированы и изучены наночастицы оксида железа Fe_3O_4 и получены системы «ядро-оболочка» на основе микрочастиц карбоната кальция с помощью загрузки МНЧ методами адсорбции и заморозки растворителя. Проведено сравнение эффективности загрузки и показано, что в системе «ядро-оболочка» масса оболочек из МНЧ может достигать значений, сопоставимых с массой частиц $CaCO_3$. С помощью анализа дифракционных данных продемонстрировано, что получение оболочки с помощью циклов заморозки/оттаивания является предпочтительным для формирования систем «ядро-оболочка» с сохранением полиморфной композиции $CaCO_3$.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 21-74-10058).

1. Xue J. et al. Magnetic drug-loaded osteoinductive Fe3O4/CaCO3 hybrid microspheres system: efficient for sustained release of antibiotics //Journal of Physics D: Applied Physics. – 2020. – Т. 53. – №. 24. – С. 245401.
2. German S. V. et al. High-efficiency freezing-induced loading of inorganic nanoparticles and proteins into micron-and submicron-sized porous particles //Scientific reports. – 2018. – Т. 8. – №. 1. – С. 17763.

ВЛИЯНИЕ ДОПИРОВАНИЯ НАНОЧАСТИЦ ДИОКСИДА ЦЕРИЯ ИОНАМИ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ НА ПРОЯВЛЯЕМУЮ ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКУЮ АКТИВНОСТЬ

Муллаярова А.Р.[1], Бажукова И.Н.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: mullayarova.alexandra@mail.ru

EFFECT OF CERIUM DIOXIDE NANOPARTICLES DOPING WITH RARE EARTH METAL IONS ON THE PHOTOCATALYTIC ACTIVITY

Mullayarova A.R.[1], Bazhukova I.N.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Nanocrystalline ceria exhibits photocatalytic properties. Doping with rare earth ions modifies photocatalytic activity by changing the number of cerium atoms and oxygen vacancies. The photocatalytic activity study results of pure and doped CeO_2 nanoparticles in organic dyes solutions are presented.

В процессе окрашивания тканей расходуются немалые объемы пресных вод и используется широкий спектр органических красителей. Такое производство приводит к возникновению большого количества окрашенных сточных вод, содержащих стойкие и высокотоксичные красящие загрязнители, которые затем попадают в природные водоемы. В качестве источника энергии для детоксикации загрязненной воды может быть использован солнечный свет – под его действием происходит фотокаталитический распад молекул красителей [1].

В последние время интерес к фотокатализу растет, а для улучшения его эффективности привлекаются современные достижения в области нанотехнологий. Так, фотокатализаторы на основе наночастиц диоксида церия значительно ускоряют процесс разложения органических красителей [2]. Благодаря таким свойствам диоксида церия как окислительно-восстановительный потенциал пары Ce^{4+}/Ce^{3+}, стойкость к фотокоррозии и сильное поглощение света в ультрафиолетовой области он может быть охарактеризован и как фотокатализатор [3], и как фотопротектор [4]. Высокие удельная площадь поверхности, концентрация кислородных вакансий, реакционная способность и регенерация кислородной нестехиометрии обуславливают фотокаталитические свойства нанокристаллического церия. Легирование наночастиц диоксида церия ионами трехвалентных редкоземельных элементов позволяет улучшить их фотокаталитические или фотопротекторные свойства, сохраняя кристаллическую структуру наночастиц неизменной [5]. Это увеличивает их химическую и термическую стабильность,

обеспечивает высокую ионную проводимость и лучшее поглощение ультрафиолетового излучения.

Целью данной работы является исследование влияния легирования наночастиц диоксида церия ионами Er, Sm, Yb на проявляемую ими фотокаталитическую активность на примере катионного и анионного красителей.

Результаты исследования показали, что легирование наночастиц диоксида церия ионами трехвалентных редкоземельных металлов приводит к усилению их фотокаталитических свойств в растворе катионного красителя, и к усилению фотопротекторных свойств в растворе анионного красителя. При увеличении концентрации легированных наночастиц в растворе красителей происходит дополнительное усиление этих свойств. Дальнейшее изучение механизма легирования наночастиц диоксида церия ионами трехвалентных редкоземельных металлов позволит установить взаимосвязь между легирующим агентом наночастиц диоксида церия и свойствами, которые они проявляют в растворах катионного и анионного красителей. Это, в свою очередь, позволит синтезировать наночастицы с определенными характеристиками, подходящие под конкретное применение в промышленности (например, для очистки сточных вод).

1. Nguyen C. H. et al. Degradation of methylene blue and methyl orange by palladium-doped TiO2 photocatalysis for water reuse: Efficiency and degradation pathways. Journal of Cleaner Production 202, 413-427 (2018)
2. Chanal S. et al. Oxygen-deficient lanthanum doped cerium oxide nanoparticles for potential applications in spintronics and photocatalysis. Vacuum 177, 109395 (2020)
3. Touahra F. et al. A new approach to the synthesis of CuFe2O4@ CeO2 direct Z-scheme with a core-shell structure for enhanced photo-degradation of methyl violet under ultraviolet and visible-light irradiation. Environmental Progress & Sustainable Energy e13865 (2022)
4. Volkov A. A. et al. Synthesis and Photocatalytic Activity of Cerium (IV) Fibrous Nanostructures. Russian Journal of General Chemistry 90(2), 277-282 (2020)
5. Chen Y. et al. Structural regulation and polishing performance of dendritic mesoporous silica (D-mSiO2) supported with samarium-doped cerium oxide composites. Advanced Powder Technology 33(6), 103595 (2022)

ОЦЕНКА МОРФОФИЗИОЛОГИСЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПШЕНИЦЫ ПОД ДЕЙСТВИЕМ НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО ИОНИЗИРУЮЩЕГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Нархова А.А.[1], Вазиров Р.А.[1, 2], Звездакова Т.Н.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Уральский федеральный аграрный научно-исследовательский центр УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: chumanova.an@gmail.com

EVALUATION OF MORPHOPHYSIOLOGICAL PROPERTIES OF WHEAT UNDER THE INFLUENCE OF LOW-ENERGY IONIZING RADIATION

Narkhova A.A.[1], Vazirov R.A.[1, 2], Zvezdakova T.N.[1]
[1)] Ural Federal University
[2)] Ural Federal Agrarian Research Center of the UB RAS

The surface radiation treatment with low-energy electron radiation makes it possible to combine disinfection of wheat and stimulation of its germination. The morphophysiological wheat properties were evaluated for two types of ionizing radiation with energy up to 500 keV.

В последние 30 лет радиационная обработка все шире применяется для обработки пищевой и сельскохозяйственной продукции с целью уменьшения потерь и улучшения ее качества. Данная технология позволяет стимулировать прорастание семян, а также может быть использована для предотвращения заражения пищевых продуктов микробами и насекомыми, для улучшения технологических свойств [1]. Применение ионизирующих излучений не вызывает токсикологический опасности, не изменяет органолептических и питательных свойств продуктов при соблюдении рекомендованных доз [2] и условий облучения.

В настоящее время для радиационной обработки используются источники ионизирующего излучения, формирующие равномерное распределение поглощенной дозы по всему объему облучаемой продукции. Таким образом, возможно добиться только единственного эффекта, обусловленного сформированной дозой [2]. Инновационным решением в данной сфере может стать применение низкоэнергетического электронного пучка, который в виду своей низкой проникающей способности позволить сформировать на поверхности высокую поглощенную дозу (от 1 кГр), способствующую дезинфекции продукции, а внутри, путем генерации тормозного излучения, низкую (сГр), приводящую к возникновению стимулирующего прорастание эффекта [3].

В настоящей работе исследованы морфофизиологические свойства пшеницы Triticum aestivum под влиянием низкоэнергетического ионизирующего излучения двух типов: рентгеновское излучение (320 кэВ) и электронный пучок (500 кэВ). Облучение проводилось на медицинской терапевтической установке Xstrahl 320 (320 кэВ, мощность дозы: 1 Гр/мин, диапазон доз: 0-40 сГр) и на ускорителе электронов УРТ-0,5 (500 кэВ, доза за импульс: 0,7 кГр, диапазон доз: 0-15 кГр) [4]. Доза варьировалась путем изменения времени экспозиции.

Полученные результаты демонстрируют наличие эффекта стимуляции прорастания пшеницы при облучении дозами порядка сГр. При этом обработка низкоэнергетическим электронным пучком дозами до 15 кГр не угнетает способность пшеницы к прорастанию.

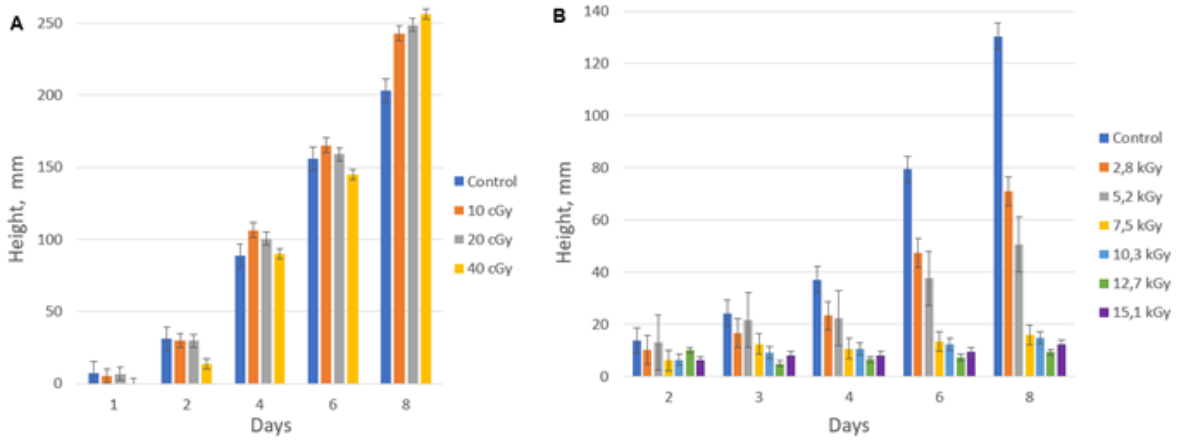


Рис. 1. Высота ростков при обработке рентгеновским излучением 320 кэВ (А) и электронным пучком 500 кэВ (В)

1. Алексахин Р.М., Санжарова Н.И., Козьмин Г.В., Гераськин С.А., Павлов А.Н. Перспективы использования радиационных технологий в агропромышленном комплексе российской федерации // Вестник РАЕН. 2014. Т. 14, №1. С. 78-85.
2. Безопасность и пищевая ценность облученной пищи // ред. И.Ю. Крепких. Москва: Медицина, 1995. 210 с.
3. Sokovnin, S. Y., Balezin, M. E., Vazirov, R. A., Timoshenkova, O. R., Krivonogova, A. S., Isaeva, A. G., & Donnik, I. M. Properties of hens' eggs after surface irradiation by nanosecond electron beam // Radiation Physics and Chemistry. 2019. Vol. 165, 108398.
4. Sokovnin, S.Yu., Balezin, M.E. Repetitive Nanosecond Electron Accelerators type URT-1 for radiation technology // Radiation Physics and Chemistry. 2018. Vol. 144, pp. 265-270.

ИЗВЛЕЧЕНИЕ ПРИЗНАКОВ И КЛАССИФИКАЦИЯ МЕДИЦИНСКИХ ИЗОБРАЖЕНИЙ С ПОМОЩЬЮ PYRADIOMICS И МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Новоселов И.Э.[1], Смирнов А.А.[1]
[1)] Уральский Федеральный Университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина
E-mail: novivan001@gmail.com

PYRADIOMICS FEATURES EXTRACTION AND MACHINE LEARNING MEDICAL IMAGES CLASSIFICATION

Novoselov I.E.[1], Smirnov A.A.[1]
[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia B. N. Yeltsin

Malignant neoplasms are among the deadliest diseases. The machine learning medical images classification can be used for diagnosis, monitoring and therapy planning. The aim of this work is to create an algorithm for Pyradiomics features extraction and machine learning medical images classification.

Злокачественные новообразования являются одними из самых смертоносных заболеваний в мире. Несмотря на то, что существует множество различных подходов лечения опухолей, продолжительность жизни пациентов, к сожалению, составляет от двух до пяти лет. В последнее время методы классификации на основе машинного обучения превзошли традиционные методы. Методы машинного обучения можно использовать для решения медицинских задач, хотя несколько лет назад они применялись лишь для немедицинских целей [1]. Поэтому классификация онкологических образований с помощью данных алгоритмов может быть использована для диагностики, мониторинга и планирования противоопухолевой терапии, что способствует экономии времени врачей на анализ полученной информации.

Целью данной работы является создание алгоритма классификации онкологических заболеваний с помощью библиотеки Pyradiomics и методов машинного обучения. Для этого необходимо: исследовать существующие методы классификации онкологических новообразований, найти набор снимков, извлечь признаки из изображений с помощью Pyradiomics, разработать алгоритм классификации, обучить его на наборе данных, оценить полученные результаты.

Алгоритм планируется создавать с помощью языка программирования Python, поскольку он доступен, прост, а также для него существует множество библиотек для расчетов и визуализации данных, извлечения признаков, создания и обучения собственных алгоритмов на основе машинного обучения.

1. A review of contemporary researches on biomedical image analysis / P.R. Lokhande, S. Balaguru, G. Deenadayalan, R.R. Ghorpade // Recent Trends in Image Processing and Pattern Recognition: Second International Conference, RTIP2R 2018, Solapur, India, December 21–22, 2018, Revised Selected Papers, Part II 2. – Springer Singapore, 2019. – P. 84-96.

ФАКТОРЫ РИСКА, ВЛИЯЮЩИЕ НА ВЫЖИВАЕМОСТЬ ПАЦИЕНТОВ С РАКОМ МОЧЕВОГО ПУЗЫРЯ

Огородникова С.Ю.[1], Магер В.О.[2], Константинова Е.Д.[3], Вараксин А.Н.[3], Анцыгин И.Н.[1]
[1)] Уральский Федеральный университет, Екатеринбург, Россия
[2)] Свердловский Областной онкологический диспансер, Екатеринбург, Россия
[3)] Институт промышленной экологии, Екатеринбург, Россия
E-mail: ogorodnikova.sveta2507@gmail.com

RISK FACTORS AFFECTING THE SURVIVAL OF PATIENTS WITH BLADDER CANCER

Ogorodnikova S.Y.[1], Mager V.O.[2], Konstantinova E.D.[3], Varaksin A.N.[3], Antsygin I.N.[1]
[1)] Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia
[2)] Sverdlovsk Regional Oncological Dispensary, Ekaterinburg, Russia
[3)] Institute of Industrial Ecology, Ekaterinburg, Russia

Bladder cancer (BC) is consistently among the ten most common malignant neoplasms worldwide. Patients with BC are describe by a high level of postoperative complications and comorbidity.

The aim of the study: analysis of risk factors affecting the duration and quality of life of patients with BC.

Численность больных раком мочеполовых органов с каждым годом продолжает расти. Среди всех локализаций данного вида онкологии рак мочевого пузыря (РМП) составляет бóльшую часть [1]. В ряде случаев основная проблема лечения РМП связана с низкой чувствительностью опухоли к консервативной органосохраняющей терапии. Радикальная цистэктомия (РЦЭ) является одной из наиболее трудных процедур в урологической хирургии из-за технической сложности [2].

Наиболее значимой числовой характеристикой исходов лечения онкологии принято считать продолжительность жизни пациентов [3].

Выживаемость пациентов после проведения оперативного вмешательства по поводу удаления мочевого пузыря зависит от целого ряда показателей, в том числе, от наличия комплекса сопутствующей патологии [4]. Также, одним из наиболее потенциально значимых факторов, влияющих на выживаемость пациентов, является курение. Однако, к настоящему времени, знания о влиянии данного фактора риска на выживаемость и эффективность лечения онкологических больных нельзя назвать полными [5].

Цель исследования: анализ влияния факторов риска (индекс коморбидности Charlson и курение табака) на выживаемость пациентов, перенесших РЦЭ по поводу РМП.

В ретроспективное исследование были включены пациенты Свердловского областного онкологического диспансера. Всего обследовано 230 больных РМП, перенесших РЦЭ в возрасте от 36 до 78 лет (средний возраст 62.0±7.2 года).

База данных включала такие сведения о пациентах, как пол, возраст, индекс коморбидности Charlson, показатели общей выживаемости, а также данные о курении.

Описательная статистика включала вычисление средних значений и их стандартных отклонений, а также медиан и перцентилей. Для анализа общей выживаемости были использованы кривые Каплана-Мейера и логранговый критерий.

По результатам оценки выживаемости курящих и некурящих пациентов, перенесших РЦЭ по поводу РМП, и имеющих различные значения индекса коморбидности Charlson (CACI), построены кривые выживаемости Каплана-Мейера.

По итогам Log-Rank Test обнаружены статистически значимые различия выживаемости пациентов с CACI<4 и CACI≥4 (p=0.002). Значимых различий продолжительности жизни курящих и некурящих пациентов обнаружено не было (p>0.05).

Оценка совместного влияния сопутствующих патологий и курения табака на выживаемость больных РМП показала, что самая высокая выживаемость характерна для некурящих пациентов с CACI<4, продолжительность жизни курящих пациентов с CACI<4 несколько ниже, и самую низкую выживаемость имеют пациенты с CACI≥4 вне зависимости от курения.

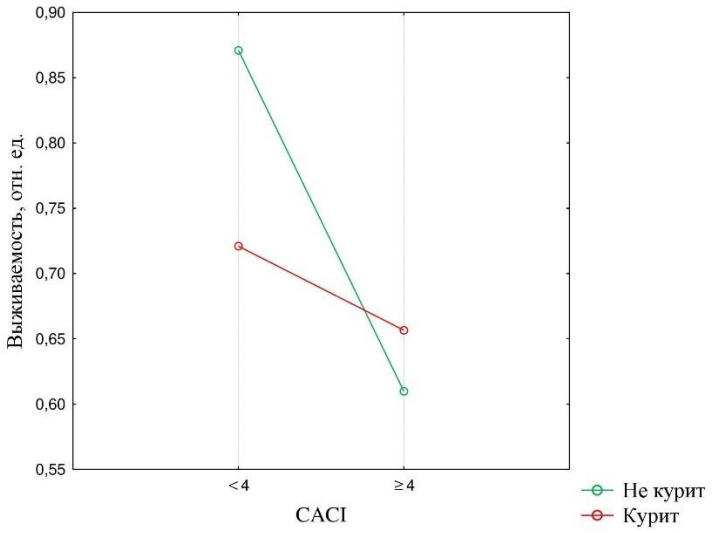


Рис. 1. Результаты анализа совместного влияния курения и величины CACI на выживаемость пациентов, перенесших РЦЭ по поводу РМП

Результаты анализа показали, что фактором неблагоприятного прогноза общей выживаемости после РЦЭ является высокая коморбидность пациента. Наше исследование не выявило статистически значимых различий общей выживаемости курящих и некурящих пациентов, в связи с чем требуется более детальное изучение влияния индекса курения на продолжительность жизни больных РМП в течение длительного времени.

1. Магер В.О., Ильин К.А., Завацкий С.Е. и др. Анализ ранних послеоперационных осложнений и летальности у больных раком мочевого пузыря, перенесших радикальную цистэктомию. Уральский медицинский журнал, (2), 100-103 (2017).
2. Hautmann R.E., Abol-Enein H., Lee C.T. et al. Urinary diversion: how experts divert. Urology, (85), 233–238 (2015).
3. Огородникова С.Ю., Константинова Е.Д. Методы визуализации данных в медико-биологических исследованиях. Траектория исследований – человек, природа, технологии, 3(3), 4-18 (2022).
4. Deyo R.A., Cherkin D.C., Ciol M.A. Adapting a clinical comorbidity index for use with ICD-9-CM administrative databases. Journal of clinical epidemiology, 45(6), 613-619 (1992).
5. Давид З., Ануш М. Влияние курения на прогноз заболевания у онкологических больных. Вопросы онкологии, 65(3), 321-329 (2019).

NATURAL ADDITIVES IN BEER

Osei E.[1], Ivantsova M.N.[1]
[1)] Institute of Chemical Engineering, Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia
E-mail: ericnanaosei1990@gmail.com

Beer has been an ancient alcoholic beverage in history and consumed in this present day with relatively changes of new recipe. Malted barley is the main ingredient, which, when milled and heated with water to extract it nutrients, provide a nourishing sugar and protein rich solution called wort.

Beer is considered as fermented alcoholic beverage obtained from series of process such as brewing and fermentation of cereals. Well known, water, malted barley, hop, and yeast are the basic ingredient used in producing beer [1].

Barley as the main source, but others like wheat, sorghum and the like are usually used as starch source, but it must go through malting method such as steeping, germination and kilning to dissolve this starch in the grain prior to brewing. Preparation of starch is done for further processes by enzymatic digestion of the grain content. Heating in kilning process produce colouring and flavouring substance. Further enzymatic conversion is done during mashing when the starch of the milled malt is fermented into sugars. Yeast converts sugar to alcohol during fermentation of cooled wort. Beer is filtered and stabilized after maturation and storage to inhibit deficiency qualities, such as decrease of flavour, turbidity or decrease of foaming stability.

Beer known as one of the most consumed beverages in the world with a variety of compound that offer both good sensorial characteristics and health advantages. Important natural health compounds present in beer with phenol as an example, which possesses antioxidant properties to scavenged free radicals produced as a by-product in human metabolism, exerting an appreciable effect against cancer or cardiovascular disease [2].

It has also been stated that, beer is composed of many compound in aqueous solution. This seems not surprising that, there is a challenge in maintaining its quality through it lifetime for brewers. Addition of chemicals like sulphur dioxide and sulphite have been considered as an additive to rescue the situation but concerns about their safety has also risen [3]. Continuous fermentation has evolved to rescue the situation. Sensorial qualities such as aroma and flavour have been added to beer through this natural process [4].

This work is mainly focused on the natural additives present in beer and their health benefit posing on human health, improved sensorial qualities of beer by these natural additives and their shelf life.

1. Taylor, J.R.N., Dlamini, B.C., Kruger, J., 2013. 125th anniversary review: the science of the tropical cereals sorghum, maize and rice in relation to lager beer brewing. Journal of the Institute of Brewing 119, 1e14.

2. Martinez-Gomez, Alvaro; Caballero, Isabel; Blanco, Carlos A. (2020). Phenols and Melanoidins as Natural Antioxidants in Beer. Structure, Reactivity and Antioxidant Activity. Biomolecules, 10(3), 400.
3. Guido, Luis F. (2016). Sulfites in beer: reviewing regulation, analysis and role. Scientia Agricola, 73(2), 189–197.
4. Campbell, S. L., 2017. The continuous brewing of beer. VI-Food-A-Beer:1-8

THE USE OF MICROWAVE RADIATION FOR CHILDREN'S FERMENTED MILK PRODUCTS

Panin M.V.[1], Alkhateeb M-Kamal[1], Geide I.V.[1], Selezneva I.S.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia
E-mail: geide_iv@mail.ru

The possibility of using the microwave method for heating kefir for feeding children has been studied. It has been established that the microwave oven does not adversely affect the organoleptic and physico-chemical parameters of yogurt. Microbiological analysis of yogurt samples was carried out.

Milk and dairy products are important for the human diet and are part of the official nutritional recommendations in many countries worldwide. They contribute high-quality nutrition in the human diet through high concentrations of micro- and macronutrients with significant amounts of calcium, magnesium, selenium, riboflavin, zinc, vitamin B12, and pantothenic acid [1, 2].

Fermented dairy products have been considered to have health- promoting properties on consumers' health for a long time. Yoghurt is the most known fermented dairy product with high consumption worldwide mainly because of the many health-promoting effects [3]. Generally, yoghurt is consumed not only because of its high nutritive value and improved organoleptic properties, but also due to its health-promoting effects, especially its probiotic effect [4].

Microwave oven is widely used as a means of food preparation. However, there is insufficient information on the sequences of microwave heating on the composition and nutritional quality of food. Microwave has been used in many fields of the food industry like pasteurization, sterilization, thawing, tempering, cooking, precooking, baking, blanching, and drying. The most notable advantages of using the microwave are the fast heating and short processing time as volumetric heat is generated with high heating efficiency and using a quarter of the time used in conventional heating while maintaining better quality in the product. This is because the high heating rate ensures that the target temperature is reached quickly, thus reducing the thermal impact on the food and minimizes the deleterious effects on sensory and nutritional characteristics of the food.

The current study compared the outcome of microwave heating of milk products with the use of water bath as a conventional approach. These approaches were compared based on various sensory and organoleptic attributes of the milk products, as well as time taken to achieve the desired temperature of between 25-28 °C.

The results showed that microwave oven was more effective at heating baby food due to a shorter time of 20 seconds using low power or 5 seconds using medium power to achieve the desired heating temperatures compared to water bath, which took from 2 min 44s to 3 min 1s to achieve the above temperatures. Moreover, it was shown that microwave heating had no adverse impacts on the sensory and organoleptic properties

of the milk products, as well as the acidity. Because of convenience, speed, and restoration of the nutritional quality of the milk products, microwave treatment is preferred to conventional heating.

In addition, it has been shown that microwave heating does not adversely affect the organoleptic, physicochemical and microbiological parameters of fermented milk products.

1. Bhat, Z. and H.J.I.J.o.D.S. Bhat, International Journal of Dairy Science, 6 (1), 1-12 (2011)
2. Raza, N. and K.-H.J.T.T.i.A.C. Kim, Trends in Analytical Chemistry, 98, 79-94 (2018)
3. Mataragas, M., et al., Food Microbiol, 28 (3), 611-616 (2011)
4. Siefarth, C., et al., Foods, 3 (2), 318-335 (2014)

ФОРМИРОВАНИЕ ДВУМЕРНЫХ ПАТТЕРНОВ В РЕАКЦИИ ГЛИКОЛИЗА

Панкратов А.А.[1]
[1)] УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина
E-mail: alexandrpankratov9@gmail.com

FORMATION OF TWO-DIMENSIONAL PATTERNS IN THE GLYCOLYSIS

Pankratov A.A.[1]
[1)] Ural Federal University

Distributed model of the Selkov-Strogatz glycolytic oscillator with two spatial variables is considered. The formation of stable spatial structures in the presence of diffusion is studied. Existence and multistability of these structures is shown.

Гликолиз или процесс окисления глюкозы - это одна из основных химических реакций, обеспечивающих процесс энергообмена в живой клетке. В связи с этим его изучение и моделирование представляет интерес для многих исследователей [1,2]. Вместе с тем, когда мы говорим о химической реакции в некоторой среде, мы не можем обойти вниманием процессы самоорганизации, вызываемые диффузией в этой среде. Неустойчивость Тьюринга является общеизвестной причиной возникновения устойчивых пространственных структур в широком круге диффузионных моделей, к которым относятся и модели реакции гликолиза.

В докладе рассмотрена распределённая модель гликолитического осциллятора Селькова-Строгаца с двумя пространственными координатами и диффузией, что соответствует протеканию реакции в двумерном реакторе, т.е. в тонкой плёнке. Изучалось влияние диффузии на переходные процессы и формируемые пространственные структуры. Показано наличие стационарных пространственных (Тьюринговских) паттернов в присутствии диффузии. Рассмотрено их многообразие, показана мультистабильность. Проведены исследования в различных параметрических зонах, соответствующих неустойчивости по Тьюрингу и изучена специфика формируемых паттернов в зависимости от параметров системы.

Исследование поддержано грантом Российского научного фонда (проект №21-11-00062)

1. Bashkirtseva, I., & Pankratov, A. Selkov glycolytic model with diffusion: Patterns, multistability, and stochastic transitions. Mathematical Methods in the Applied Sciences, T. 45. – №. 13. – С. 8142-8150. (2022)

2. Serizawa, H., Amemiya, T., & Itoh, K. Glycolytic synchronization in yeast cells via ATP and other metabolites: mathematical analyses by two-dimensional reaction-diffusion models. Natural Science, T. 6., №. 10., C. 719. (2014)

ОЦЕНКА СБАЛАНСИРОВАННОСТИ СУТОЧНОГО РАЦИОНА ВЕГАНОВ ПО ПИЩЕВОЙ ЦЕННОСТИ

Перминова А.А.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина
E-mail: alyonaperminova61@yandex.ru

EVALUATION OF THE BALANCE OF THE DAILY DIET OF VEGANS BY NUTRITIONAL VALUE

Perminova A.A.[1]
[1)] Ural Federal University named after the First President of Russia B.N. Yeltsin

Essential nutrients are compounds necessary for humans that cannot be synthesized on their own. The inability to synthesize a certain substance by the body leads to disruption of its normal operation, which is why the intake of essential amino acids into the body with food is so important.

Незаменимые пищевые вещества — необходимые для человека соединения, которые не могут быть самостоятельно синтезированы. Например, все белки, производимые организмом, собираются в клетках из 20 протеиногенных аминокислот, только часть, из которых может синтезироваться организмом. Невозможность синтеза определённого белка организмом приводит к нарушению его нормальной работы, именно поэтому так важно поступление незаменимых аминокислот в организм с пищей [1].

В ходе исследований были выявлены функции и свойства незаменимых нутриентов, а также чем может быть опасен для человека их дефицит и избыток, были рассмотрены методы определения аминокислотного состава пищевых продуктов и альтернативные продукты, имеющие в своем составе все незаменимые аминокислоты в наибольшем процентном содержании.

В настоящее время проводится анализ суточных рационов людей, практикующих веганство для дальнейшего составления для них оптимального рациона с учетом их вкусовых предпочтений и сбалансированности по пищевой ценности.

1. Липатов, Н.Н. Формализованный анализ амино- и жирокислотной сбалансированно-сти сырья, перспективного для проектирования продуктов детского питания с задавае-мой пищевой адекватностью / Н.Н. Липатов, Г.Ю. Сажинов, О.Н. Башкиров // Хране-ние и переработка сельхозсырья, 2001. – № 8. – С. 11–14.

A COMPARISON OF THREE METHODS FOR MARKERS SELECTION IN UNTARGETED LIPIDOMICS

Polanco Espino F.J.[1], Demicheva E.I.[1, 2], Ushenin K.S.[1, 2], Solovyova O.E.[1, 2]
[1)] Ural Federal University named after the First President of Russia B.N. Yeltsin
[2)] Institute of Immunology and Physiology of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences
E-mail: fpolancoespino@gmail.com

In the present paper is analyzed different algorithms for the marker's selection of mass-spectrometry data in lipidomics. The goal of the investigation is to highlight the shortcomings and advantages of the processes and determine the most suitable.

In the present paper is analyzed different algorithms for the marker's selection of mass-spectrometry data in lipidomics. The goal of the investigation is to highlight the shortcomings and advantages of the processes and determine the most suitable.

High-performance liquid chromatography-Mass Spectrometry (HPLC-MS) is a powerful analytical technique used for identification of structure and chemical properties of different molecules[3]. The process of this data is divided into 4 steps, pre-processing, filtration, lipid identification, and statistical analysis. For this study a path composed of the XCML and the Lipidfinder algorithms for preprocessing, filtration and lipid identification step was selected.

The present paper is aimed to analyze the use of 3 different paths for markers selection in mass spectrometry data in lipidomics. In the present work we selected 3 different paths for the statistical analysis and compared them to select the most suitable. The first two paths are composed by different steps, normalization, scaling, correlation analysis and volcano plot. One of them uses vector length normalization[1] and the second one quantile normalization[2]. The third path uses decision trees. In the three cases the goal was to determine the statistical significance of the results and differentiate the substances with a greater difference between both groups.

The data used was of 10 mice, 5 of them were taken with immunodeficiency state, whereby other 5 animals were healthy. It is characterized by a large size and a big dispersion in the intensity ranges of each of the identified substances, which makes it difficult to identify the most significant of them in the statistical analysis.

The research funding from the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (Ural Federal University Program of Development within the Priority-2030 Program) is gratefully acknowledged.

1. Smith, C. A., Want, E. J., O'Maille, G., Abagyan, R. & Siuzdak, G. XCMS: Processing Mass Spectrometry Data for Metabolite Profiling Using Nonlinear Peak Alignment, Matching, and Identification. Anal. Chem. 78, 779–787 (2006)
2. Alvarez-Jarreta, J. et al. LipidFinder 2.0: advanced informatics pipeline for lipidomics discovery applications. Bioinformatics 37, 1478–1479 (2021)

3. Mukherjee, P. K. Chapter 11 - LC–MS: A Rapid Technique for Understanding the Plant Metabolite Analysis. in Quality Control and Evaluation of Herbal Drugs (ed. Mukherjee, P. K.) 459–479 (Elsevier, 2019). doi:10.1016/B978-0-12-813374-3.00011-9
4. Fahy, E. et al. LipidFinder on LIPID MAPS: peak filtering, MS searching and statistical analysis for lipidomics. Bioinformatics 35, 685–687 (2019)
5. Xi, B., Gu, H., Baniasadi, H. & Raftery, D. Statistical Analysis and Modeling of Mass Spectrometry-Based Metabolomics Data. in Mass Spectrometry in Metabolomics: Methods and Protocols (ed. Raftery, D.) 333–353 (Springer New York, 2014). doi:10.1007/978-1-4939-1258-2_22

БАРООБРАБОТКА КАК ФАКТОР СТИМУЛЯЦИИ ПРОРАСТАНИЯ СЕМЯН САЛАТА

Процив С.Д.[1, 2], Кругликов Н.А.[2], Беляев А.Ю.[3], Быструшкин А.В.[4]
[1)] Уральский Федеральный Университет имени первого президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург
[2)] Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург
[3)] Институт экологии растений и животных УрО РАН, Екатеринбург
[4)] Курганский государственный университет, Курган
E-mail: Stepan3785@mail.ru

HIGHT PRESSURE TREATMENT AS GERMINATION STIMULATION FACTOR FOR LETTUCE SEEDS

Protsiv S.D.[1, 2], Kruglikov. N.A.[2], Belyaev A.Y.[3], Bystrushkin A.V.[4]
[1)] Ural Federal University named after the First President of Russia B.N. Yeltsin, Yekaterinburg
[2)] M.N. Mikheev Institute of Metal Physics, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg
[3)] Institute of Plant and Animal Ecology, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg
[4)] Kurgan State University, Kurgan

The purpose of this work was to study the effect of hydrostatic pressure on lettuce seeds and the subsequent germination and development of seedlings. According to the results of the study, the linear growth of the length index relative to the control group was confirmed.

Одним из относительно новых методов исследований в биофизике, является воздействие на объект давлением, т.е. барообработка [1]. Подобные исследования постепенно внедряются в сельскохозяйственное направление для развития растениеводства.

Салат – популярная культура, благодаря таким качествам, как низкая калорийность, высокая питательная ценность, полная съедобность, высокая скорость вегетации и неприхотливость. Это делает салат культурой, востребованной в специфичных условиях, когда потребность человека в витаминах остается, а условия этому не способствуют. Например, при длительных путешествиях в ограниченном пространстве [2]. Целью данной работы являлось исследование оказываемого влияния гидростатического давления на семена салата и последующей всхожести и развития проростков.

Мы исследовали посевные качества семян салата сорта «Успех» прошедших предварительную барообработку от 12.10.22. Было исследовано 5 групп (контрольная, 5МПа, 10МПа, 15МПа, 20МПа). Ранее нами уже был проведен подобный опыт, ознакомиться с которым можно, перейдя к списку литературы [3]. Барообработку проводили в дистиллированной воде в

гидроцилиндре. Для создания механического усилия и записи данных о перемещении поршней использовали машину для механических испытаний Shimadzu AGS-X с максимальным усилием 2 кН. Скорость набора давления составляла 80 кПа/с. Время удержания давления после набора усилия составляло 5 мин. Сброс давления осуществляли в течение 1 секунды. На этот раз мы выждали 53 дня с момента барообработки и 03.12.22 высадили семена в чашки Петри на смоченную дистиллированной водой фильтровальную бумагу. Проращивание проводили в специально оборудованной комнате со стабилизированными параметрами температуры и влажности. Спустя 18 дней (21.12.22) с момента посадки были проведены измерения длины гипокотелей и корешков растений.

По результатам исследования были сделаны следующие выводы: методом линейной регрессии на графике зависимости длины проростка от давления был подтверждён, как и в первом эксперименте [3], линейный рост показателя длины относительно контрольной группы (18 мм). Однако мы наблюдали заметный спад средней длины при давлении в 10 МПа и 15 МПа: 11,6 мм и 16,3 мм соответственно. Такие низкие показатели возможно обусловлены запланированным промедлением в 53 дня перед посадкой и, как следствие, негативным влиянием указанного давления на образование и дальнейшее развитие ростка. При давлении же в 20 МПа средние показатели длины проростков превысили контрольные на 7,7 мм, что свидетельствует о проявлении стимулирующего эффекта гидростатического давления в 20 МПа на семена, даже после их длительного хранения. Возрастает скорость развития растений и улучшаются их посевные качества. Работа будет продолжена по части выяснения причин сниженных показателей при промежуточных давлениях, а также по части установления оптимального давления, стимулирующего максимальный рост и развития проростков или же подтверждения, что таким давлением является 20 МПа.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-26-00346, https://rscf.ru/project/22-26-00346/.

1. Н.А. Кругликов, А.Г. Быструшкин, А.Ю. Беляев, Влияние экстремальных физических факторов на биологические свойства семян солодки уральской. — Известия РАН. Серия физическая 86, 219 (2022)
2. https://lifehacker.ru/salat-v-kosmose/
3. XXII Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества памяти М.И. Куркина (СПФКС-22), Тезисы докладов, г. Екатеринбург: ИФМ УрО РАН, 2022, (291)

ВЛИЯНИЕ РАДИАЦИОННОЙ ОБРАБОТКИ НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИМ ЭЛЕКТРОННЫМ ПУЧКОМ НА СВОЙСТВА КРАХМАЛА И РЕДУЦИРУЮЩИХ САХАРОВ ПШЕНИЦЫ

Пустотина А.А.[1], Вазиров Р.А.[1, 2]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
[2)] ФГБНУ "Уральский федеральный аграрный научно-исследовательский центр УрО РАН"
E-mail: pustotinasasha@gmail.com

THE EFFECT OF LOW-ENERGY ELECTRON BEAM TREATMENT ON THE PROPERTIES OF STARCH AND REDUCING SUGARS OF WHEAT

Pustotina A.A.[1], Vazirov R.A.[1, 2]
[1)] Ural Federal University named after the First President of Russia B.N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia
[2)] State Scientific Institution Ural Scientific Research Veterinary Institute of the Russian Academy of Agricultural Sciences

The properties of search in what were studied after irradiation with low-energy electron beam (LEEB) doses of 3, 6 and 10 kGy. The results of the iodine starch test and the optical density spectrum of samples showed a lower effect on the starch content when irradiated with LEEB.

Обеспечение продовольственной безопасности и повышение качества производимой продукции – ключевое направление развития в области агропромышленного комплекса. Радиационная обработка эффективно снижает видовое и численное содержание насекомых-вредителей и микроорганизмов, а возможность обработки упакованной продукции значительно снижает вероятность повторной контаминации [1].

Ввиду проникающей способности ионизирующего излучения имеет место изменение содержания и свойств крахмала, редуцирующих сахаров, а также влияние на белковую структуру, выступающее нежелательным эффектом [2, 3]. Применение ускорителей электронов с энергией до 1 МэВ позволяют проводить поверхностную обработку, снижая вероятность радиационно-химических процессов и нарушения биологических структур во внутреннем объёме облучаемого объекта, что в свою очередь обеспечивает сохранение пищевой ценности и органолептических свойств продукции.

В настоящей работе исследовано оказываемое влияние радиационной обработки пучком электронов на ускорителе УРТ-0.5 [4] и УЭЛР-10-10С на основные химические показатели зерна пшеницы сорта Екатерина [5].

Исследование проводилась путем сравнения содержания крахмала в облученных и контрольном образцах методом йодкрахмальной пробы и

регистрации спектра оптической плотности растворов образцов. Для подтверждения выводов о более щадящем действии обработки ускоренными электронами с энергией 500 кэВ осуществлено сопоставление с результатами образцов, облученных электронами с энергией 10 МэВ.

Образцы подвергались облучению электронами с энергией 10.0 и 0.5 МэВ с поглощенной дозой 3, 6 и 10 кГр. Облучение производилось с двух сторон. Измерение величины поглощённой дозы определялось с использованием пленочных дозиметров СО ПД(Э)-1/10. Регистрацию спектров оптической плотности проводили на спектрофотометре ПЭ-5400ВИ.

Результаты показали наличие изменений в содержании крахмала для всех облучённых образцов. Установлена тенденция снижения содержания крахмала при увеличении дозового воздействия образцов. Дальнейшее изучение характера изменение свойств крахмала при хранении, оценка содержания редуцирующих сахаров и подбор оптимальной дозовой нагрузки позволит сделать вывод о возможности внедрения данного способа обработки в качестве метода послеуборочной обработки зерна.

1. Gryczka, Urszula et al. “Efficacy of low energy electron beam on microbial decontamination of spices.” Radiation Physics and Chemistry 170 (2020)
2. Manupriya B. R. et al. Study of gamma irradiation effects on the physico-chemical properties of wheat flour (Triticum aestivum, L.) //Radiation Physics and Chemistry. T.172. - C. 108693. (2020)
3. Luo X. et al. Effects of electron beam irradiation on storability of brown and milled rice //Journal of Stored Products Research. – T. 81. – C. 22-30. (2019)
4. Kotov Y. A., Sokovnin S. Y., Balezin M. E. YPT-0.5 repetitive-pulse nanosecond electron accelerator //Instruments and Experimental Techniques. – T. 43. – C. 102-105. (2000)
5. Зезин Н. Н. и др. Характеристика нового сорта яровой пшеницы Екатерина и технология его возделывания в условиях Среднего Урала (практические рекомендации). (2016)

РАЗРАБОТКА МЕТОДИКИ ОЦЕНКИ ЖИЗНЕСПОСОБНОСТИ МИКРООРГАНИЗМОВ ТУРБИДИМЕТРИЧЕСКИМ МЕТОДОМ

Сабанин К.И.[1], Чернов С.О.[1], Бажукова И.Н.[1], Прокопьева О.Е.[1]
[1)] Физико-технологический факультет, Уральский Федеральный университет, 6200
E-mail: kirill-sabanin.2018@yandex.ru

DEVELOPMENT OF A METHODOLOGY FOR ASSESSING THE VIABILITY OF MICROORGANISMS BY THE TURBIDIMETRIC METHOD

Sabanin K.I.[1], Chernov S.O.[1], Bazhukova I.N.[1], Prokopieva O.E.[1]
[1)] Institute of Physics and Technology, Ural Federal University, 620002, 19 Mira Street, Ekaterinburg, Russia.

Turbidimetry - quantitative analysis of the composition and properties of substances, based on measuring the amount of light absorbed by a suspension. In our study, an attempt was made to create a method for assessing the viability of microorganisms by the turbidimetric method, which in the future c

В последние десятилетия увеличилось использование в медицине различных конструкций и устройств, а именно имплантов, стентов, катетеров и др. К сожалению, неизбежно приходится сталкиваться с проблемой, заключающейся в образовании парапротезной инфекции. Особенностью таких инфекций является образование биопленок. Поэтому актуальной задачей является поиск способов профилактики имплант-ассоциированных инфекций. Один из возможных способов решения указанной проблемы - создание антибактериальных покрытий на поверхности имплантов.

Традиционные подходы по оценке антимикробной активности материалов требуют специализированную лабораторию и биоматериалы, а также являются длительными по времени (время анализа примерно две недели). Таким образом, требуется поиск альтернативных методов экспресс-оценки антибактериальной активности материалов, которым может стать турбидиметрический метод.

В основе разрабатываемой методики были положены эксперименты по оценке жизнеспособности микроорганизмов на базе спектрофотометра. Анализ объектов для исследования состоял в выборе микроорганизмов, удовлетворяющих следующим критериям: доступность и простота в использовании; пригодность для оптических методов исследования, а именно их рост должен вызывать равномерное помутнение среды и при этом не должно происходить образования мицелия, пленок и других скоплений. Для эксперимента были выбрали дрожжи винные штамма Saccharomyces cerevisiae, бифидобактерии штамма B. Bifidum 1, лактобактерии штамма Lactobacillus plantarum, кишечная палочка штамма E.coli M-17. Разводили суспензии и измеряли их оптическую плотность на разных длинах волн, затем на основе

полученных данных построили график зависимости оптической плотности от длины волны для каждой из микрочастиц. Заключили, что на длине волны 550 нм поглощение света водой минимально, а значит в данной области длин волн поглощение преимущественно обусловлено микрочастицами, то есть данные длины волн оптимальны при использовании нашего метода.

Для проверки бактерицидных свойств покрытий, которые в перспективе могут наноситься на протезы, поместили данные материалы на сутки в один сосуд с суспензией микрочастиц и инкубировали в термостате, имитирующем внутреннюю среду организма. Зарегистрировано, что оптическая плотность суспензий после инкубирования с исследуемыми покрытиями заметно уменьшилась.

В результате выполнения настоящей работы выполнен выбор объектов-микроорганизмов для экспресс-оценки антибактериальной активности материалов. Измерены спектры оптической плотности суспензий микроорганизмов и выбрана оптимальная длина волны (550 нм) для оценки жизнеспособности микроорганизмов. Проведены исследования антимикробной активности углеродсодержащих материалов. Показано, что после инкубации микроорганизмов с этими материалами происходит снижение оптической плотности в области 550 нм, что может свидетельствовать о снижении количества клеток и бактерицидном эффекте.

1. Г.Н. Амелина, Л.А. Леонова. «Нефелометрия и турбидиметрия». Рец. к. х. н. Н.Б. Егоров. Сост. ФГБАОУ ВО НИ ТПУ, 2015.
2. С.А Лысенко, М.М. Кугейко. «Нефелометрический и турбидиметрический метод измерения массовых концентраций городских аэрозолей и их респирабельных фракций». Сост. ФГБАОУ ВО НИ БГУ, 2013.
3. Н.М. Березина, А.В. Волков, М.И. Базанов, Н.Г. Дмитриева. «Физико-химические методы анализа (фотометрия и турбидиметрия)»: учеб. пособие; Иван. гос. хим. технол. ун-т. – Иваново, 2018. – 104 с.

СРАВНИТЕЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ И ОРГАНОЛЕПТИЧЕСКИХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ ЯИЦ ПТИЦЫ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ ЭЛЕКТРОННЫМ ПУЧКОМ ВЫСОКОЙ И НИЗКОЙ ЭНЕРГИИ

Сафронова А.В.[1], Вазиров Р.А.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
[2)] ФГБНУ "Уральский федеральный аграрный научно-исследовательский центр УрО РАН", г. Екатеринбург, Россия
E-mail: safronova.123@yandex.ru

COMPARATIVE STUDY ON PHYSICAL-CHEMICAL PARAMETERS AND ORGANOLEPTIC VARIABLES OF POULTRY EGGS TO IRRADIATION BY HIGH AND LOW-ENERGY ELECTRON BEAM

Safronova A.V.[1], Vazirov R.A.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia
[2)] State Scientific Institution Ural Scientific Research Veterinary Institute of the Russian Academy of Agricultural Sciences, Ekaterinburg

The use of radiation treatment of chicken eggs to extend the shelf life. The irradiation was carried out with an electron beam dose in the range of 1-10 kGy. The analysis was carried out by evaluating the organoleptic and physico-chemical parameters of the irradiated and control samples.

Микробное загрязнение яиц патогенами пищевого происхождения такими как Salmonella enterica является достаточно распространенным явлением и имеет важные экономические последствия для птицеводческой промышленности. Употребление в пищу сырых или недоваренных яиц является основной причиной сальмонеллеза человека [1]. Поэтому существует необходимость обеззараживания куриных яиц для пищевой промышленности.

На сегодняшний день стандартным способом удаления патогенных микроорганизмов является пастеризация и химическая обработка, однако они могут негативно влиять на качество термочувствительных яичных продуктов [2]. Радиационная обработка дает значительные преимущества, уничтожая вредные патогены и продлевая срок годности пищевых продуктов [3]. Исследования Badr H. M., Min B. показали, что облучение яичных продуктов в дозе 2 – 3 кГр было достаточным для повышения их микробиологической безопасности без неблагоприятных химических изменений, которые могут повлиять на их функциональные свойства. Использование более высокой поглощенной дозы приводит к изменению аминокислотного состава куриного белка и желтка, а также изменению состава липидов яичного желтка [3, 4]. Поэтому для снижения влияния воздействия излучения возможно использовать низкоэнергетический

электронный пучок (НЭЭП) для создания неравномерного распределения поглощенной дозы по глубине объекта.

В работе проведен сравнительный анализ воздействия на физико-химические свойства и органолептические показатели после поверхностной радиационной обработки куриных яиц электронами с энергией 10 МэВ и 0,5 МэВ. Для оценки качества яиц исследовались следующие показатели: единицы Хау, индекс желтка и белка, мутность альбумина, пенообразующая способность белка и стабильность пены, pH [2].

В качестве объекта исследования выбрали куриные яйца категории С1. Для сравнения облучение проводили на двух установках: электронном ускорителе УРТ-0.5 (0,5 МэВ) и электронном ускорителе УЭЛР-10-10С (10 МэВ). Диапазон используемых поглощенных доз: 1–10 кГр. Контроль облучения проводился с использованием пленочных дозиметров СО ПД(Ф)Э-5/50 и СО ПД(Э)-1/10.

Облучение куриных яиц электронным пучком с энергией 10 МэВ повысило мутность яичного белка, но снизило вязкость, пенообразующая способность и стабильность пены ухудшились. При облучении НЭЭП значительного влияния на органолептические свойства продукции не выявлено. Полученные результаты позволяют сделать вывод о возможности применения метода радиационной обработки с использованием НЭЭП для антимикробной обработки столовых куриных яиц.

1. Humphrey T. J. Contamination of egg shell and contents with Salmonella enteritidis: a review // International journal of food microbiology. Т. 21. №. 1-2. С. 31-40. (1994).
2. Bermudez-Aguirre D., Niemira B. A. A review on egg pasteurization and disinfection: Traditional and novel processing technologies // Comprehensive Reviews in Food Science and Food Safety (2022).
3. Badr H. M. Effect of gamma radiation and cold storage on chemical and organoleptic properties and microbiological status of liquid egg white and yolk // Food chemistry. Т. 97. №. 2. С. 285-293. (2006).
4. Min B. et al. Irradiation of shell egg on the physicochemical and functional properties of liquid egg white // Poultry Science. Т. 91. №. 10. С. 2649-2657. (2012).

ОЦЕНКА ПРОТЕОЛИТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ ЙОГУРТОВЫХ КУЛЬТУР

Савлукова Ю.О.[1, 2], Тихонов С.Л.[1], Ковалева Е.Г.[2]
[1)] Уральский государственный экономический университет, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: yu.savlucova@yandex.ru

EVALUATION OF THE PROTEOLYTIC ACTIVITY OF YOGHURT STARTER CULTURES

Savlukova I.O.[1, 2], Tikhonov S.L.[1], Kovaleva E.G.[2]
[1)] Ural State University of Economics, Yekaterinburg, Russia
[2)] Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia

In this work, the proteolytic activity of yoghurt starter cultures was measured. The effect of iodine and selenium on the activity of protease enzymes of Streptococcus thermophilus and Lactobacillus delbrueckii subsp. Bulgaricus, was established.

Проблема комбинированного дефицита йода и селена в развитии заболеваний щитовидной железы продолжает оставаться актуальной.

Совместное поступление в организм йода и селена в пределах рекомендуемых норм среднесуточной физиологической потребности необходимо для нормальной выработки щитовидной железой тиреоидных гормонов [1].

На данный момент интерес представляют йодоорганические и селенорганические соединения в составе продуктов питания ежедневного потребления.

Установлено, что при наращивании биомассы молочнокислых микроорганизмов в питательной среде, содержащей дополнительно йод и селен, образуются йодсодержащие и селенсодержащие аминокислоты, которые представляют собой органические биологически доступные формы данных микроэлементов [2].

В данной работе была проведена оценка протеолитической активности йогуртовых культур в среде, включающей одновременно синергически связанные микроэлементы йод и селен.

Объектами исследования являлись молочнокислые бактерии Streptococcus thermophilus и Lactobacillus delbrueckii subsp. bulgaricus в соотношении 1:1. Модификацию субстрата проводили внесением неорганических соединений йода и селена (калия йодат, натрия селенит) в различных концентрациях.

Микроорганизмы Streptococcus thermophilus, Lactobacillus delbrueckii subsp. Bulgaricus в процессе сквашивания молока продуцируют различные пептидазы и

протеиназы. Streptococcus thermophilus демонстрируют большую экзопептидазную активность, Lactobacillus delbrueckii subsp. Bulgaricus напротив имеют высокую эндопептидазную активность. Такая картина дополнительно подтверждает ассоциативные взаимоотношения, существующих между данными микроорганизмами. Так, благодаря эндопептидазам L.delbrueckii подвида bulgaricus происходит гидролиз казеина с образование пептидов, которые в свою очередь подвергаются воздействию экзопептидазам S.thermophilus с выделением аминокислот [3].

Для оценки активности казеиназы йогуртовой закваски использовали молочный агар Эйкмана, где в качестве субстрата применяли обезжиренное молоко [4]. Степень активности образуемых протеолитических ферментов при наличии в среде различных концентраций соединений йода и селена определяли по образованию прозрачных ореол вокруг зоны роста бактерий, что свидетельствовало о пептонизации казеина.

Активность протеолитических ферментов оценивали модифицированным методом Ансона для кислых протеиназ (pH 5,0), в соответствии с ГОСТ 20264.2-88 «Препараты ферментные методы определения протеолитической активности».

В результате работы определено, что внесение йода и селена в питательную среду оказывает стимулирующее воздействие на рост и протеолитическую активность исследуемых молочнокислых культур. Установлено оптимальное количество йода и селена для одновременного внесения в субстрат.

Полученные результаты в дальнейшем послужат основой для разработки йогуртового продукта, способного при систематическом потреблении поддерживать нормальное функционирование щитовидной железы, здоровье и работоспособность человека.

Данная работа была выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ 20-66-47017.

1. Трошина Е.А., Сенюшкина Е.С., Терехова М.А., Роль селена в патогенезе заболеваний щитовидной железы, Клиническая и экспериментальная тиреоидология, 14(4), 192-205, (2018)
2. Хамагаева И.С., Перспективы использования пробиотических микроорганизмов в современной биотехнологии, Вестник ВСГУТУ, 5(50), 111-116, (2014)
3. Тамим А.Й., Робинсон Р.К., Йогурт и аналогичные кисломолочные продукты: научные основы и технологии, СПб: Профессия, (2003)
4. Китаевская С.В., Пономарев В.Я., Решетник О.А., Оценка протеолитической активности новых штаммов лактобацилл с криорезистентными свойствами, Известия вузов. Прикладная химия и биотехнология, 12(1), 76-86, (2022)

ОБРАБОТКА СЕМЯН УКРОПА ГИДРОСТАТИЧЕСКИМ ДАВЛЕНИЕМ И ВОЗДЕЙСТВИЕ ЭТОГО ФАКТОРА НА ПРОРАСТАНИЕ СЕМЯН И ДАЛЬНЕЙШЕЕ РАЗВИТИЕ ПРОРОСТКОВ

Шаваров С.Ю.[1], Кругликов Н.А.[2]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина
[2)] Институт физики металлов имени М. Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук
E-mail: stas.shavarov.81@mail.ru

TREATMENT OF DILL SEEDS BY HYDROSTATIC PRESSURE AND THE EFFECT OF THIS FACTOR ON SEED GERMINATION AND FURTHER DEVELOPMENT OF SPROUTS

Shavarov S.Y.[1], Kruglikov N.A.[2]
[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin
[2)] M. N. Mikheev Institute of Physics of Metals, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences

The purpose of this work was to study the effect of hydrostatic pressure treatment of dill seeds on their laboratory germination and further development of sprouts. It was necessary to confirm the hypothesis about the positive effect of pressure on the germination and growth rate of dill seeds.

Для развития растениеводства требуется изучение различных физических факторов, влияющих на прорастание семян. При достаточно глубоком изучении таких факторов можно моделировать и применять наиболее эффективные агротехники. Одним из малоизученных факторов является гидростатическое давление, его влияние на семена [1].

Укроп – широко распространенная культура во всех странах мира. Растение устойчиво к большинству заболеваний, его агротехника достаточно проста. Фитомасса укропа богата витаминами, минеральными солями, кислотами и эфирным маслом, придающим растению специфический аромат. Укроп используют в кулинарии и как лекарственное растение. Целью данной работы являлось исследование влияния обработки семян укропа гидростатическим давлением на их лабораторную всхожесть в контейнерах и рулонным способом в баночках с открытым верхом [3].

Перед посевом семена подвергали обработке давлением от 5 до 20 МПа (с шагом в 5 МПа) в гидроцилиндре, заполненном дистиллированной водой. Для создания механического усилия и записи данных использовали испытательную машину Shimadzu AGS-X с максимальной нагрузкой 20 кН. Давление набирали со скоростью 80 кПа/с, удерживали его в течение 5 минут и сбрасывали в течение 1 секунды. Семена после барообработки без подсушивания помещали в

герметичные контейнеры на увлажненную фильтровальную бумагу. Проращивание проводили в темноте при температуре 20°С в соответствии с ГОСТ [2]. Контейнеры регулярно открывали для вентилирования и учета проросших семян.

Результаты учета проросших семян укропа сорта «Грибовский» на седьмые сутки после посева получились однозначными – барообработка в исследованном диапазоне давлений угнетает прорастание семя. Доля проросших семян упала с 28% (контрольная группа, 0 МПа) до 16% в лучшем случае (10 МПа), и до 8% в худшем случае (20 МПа).

После был проведен эксперимент с посадкой обработанных семян укропа сорта «Аллигатор» рулонным способом. При учете результатов на одиннадцатые сутки после посадки доля проросших семян снова оказалась мала (30% у контрольной группы (0 МПа), 5% (10 МПа, 20 МПа)), что подтвердило угнетение семян после барообработки. Также, были проведены замеры длины корня, общей длины проростка, наличие настоящего листа, семядолей и боковых корней. На основе этих данных можно будет сделать выводы о влиянии гидростатического давления на дальнейшее развитие проростков укропа.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-26-00346, https://rscf.ru/project/22-26-00346/.

1. Н.А. Кругликов, А.Г. Быструшкин, А.Ю. Беляев, Влияние экстремальных физических факторов на биологические свойства семян солодки уральской. — Известия РАН. Серия физическая 86, 219 (2022).
2. ГОСТ 12038-84, Межгосударственный стандарт, Семена сельскохозяйственных культур, Методы определения всхожести, 21 (1986).
3. https://studbooks.net/1784519/pedagogika/metodika_zakladki_provedeniya_opyta/.

РОСТ МЕЗЕНХИМАЛЬНЫХ СТВОЛОВЫХ КЛЕТОК НА ПОВЕРХНОСТИ МАГНИТНЫХ КОНДУИТОВ ДЛЯ ИНЖЕНЕРИИ НЕРВНОЙ ТКАНИ В ПЕРЕМЕННОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Шлапакова Л.Е.[1], Сурменева М.А.[1], Сурменев Р.А.[1]
[1)] Национальный исследовательский Томский политехнический университет
E-mail: les2@tpu.ru

THE GROWTH OF MESENCHYMAL STEM CELLS ON THE SURFACE OF MAGNETIC CONDUITS FOR NERVE TISSUE ENGINEERING IN AN ALTERNATING MAGNETIC FIELD

Shlapakova L.E.[1], Surmeneva M.A.[1], Surmenev R.A.[1]
[1)] National Research Tomsk Polytechnic University

Novel magnetic nerve guidance conduits were fabricated by electrospinning. Physico-chemical and biological properties of the conduits were comprehensively investigated. The composite conduits were shown to support cell proliferation, and thereby are prospective for use in tissue engineering.

Повреждения периферической нервной системы приводят к потере сенсорной и моторной функций конечностей, что существенно снижает качество жизни миллионов пациентов в мире. В клинической практике подобные травмы восстанавливают путем имплантации донорского нерва, однако данный подход имеет ряд ограничений [1]. Поиск альтернативных стратегий терапии повреждений нервной системы остается актуальной проблемой биомедицины. Кондуит для инженерии нервной ткани представляют собой полимерную трубку, которая соединяет проксимальный и дистальный концы поврежденного нерва, направляя рост аксонов и обеспечивая механическую поддержку нового нерва и его физическую защиту в окружающей среде [2]. Одним из методов стимуляции восстановления нервной ткани является включение в полимерную матрицу магнитных наночастиц с последующим применением внешнего магнитного поля (МП) [3]. Целью данного исследования является изготовление магнитоактивных кондуитов на основе биосовместимого и биоразлагаемого поли-3-оксибутирата (ПОБ) и наночастиц магнетита (Fe_3O_4) и комплексное исследование их физико-химических свойств. Помимо этого, мы оценили пролиферацию мезенхимальных стволовых клеток (МСК) на поверхности полученных кондуитов в переменном МП.

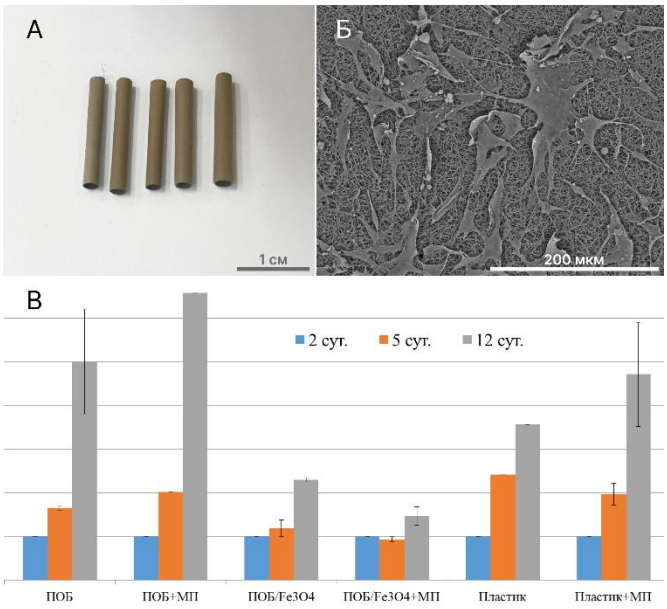


Рис. 1. Кондуиты ПОБ/Fe_3O_4 (А); СЭМ-изображение МСК на поверхности кондуита (Б); рост МСК на исследуемых кондуитах в переменном МП и без него (В)

Электроформованные кондуиты обладают пористой волокнистой структурой, необходимой для транспорта нутриентов и метаболитов. Диаметр волокон составляет 1,2± 0,1 мкм. Средняя шероховатость волокон ПОБ/Fe_3O_4 увеличивается от 11,2±1,9 до 19,4±5,5 нм в сравнении с чистым ПОБ. Развитая поверхность волокон ПОБ/Fe_3O_4, а также их повышенная гидрофильность могут положительно влиять на клеточную адгезию. Кондуиты ПОБ/Fe_3O_4 обладают высокой намагниченностью насыщения 7,5±0,1 эме/г. На основании рентгенофазового анализа мы предполагаем, что введение частиц Fe_3O_4 способствует увеличению электроактивной β-фазы ПОБ. Пьезоэлектрические сигналы ПОБ могут ускорять восстановление ткани [4], наряду с магнитомеханической стимуляцией. Кроме того, установлено усиление пластичности кондуитов ПОБ/Fe_3O_4 в сравнении с чистым ПОБ, что предпочтительно для материалов нервной тканевой инженерии [2]. При добавлении магнитных частиц модуль Юнга (жесткость материала) снижается от 468±11 до 221±52 МПа, в то время как удлинение до разрыва увеличивается от 18±4 до 29±3%.

In vitro исследования МСК на поверхности кондуитов показали, что образцы ПОБ и ПОБ/Fe_3O_4 поддерживают выживание, адгезию и пролиферацию клеток. На 12-е сутки культивирования МСК показывают ускоренный рост на кондуитах ПОБ в сравнении с культуральным пластиком. Помимо этого, переменное МП повышает рост МСК на поверхности ПОБ.

В данном исследовании получены электроформованные магнитные кондуиты нового состава. Морфология, топография, механические и магнитные свойства кондуитов оптимизированы для применения в инженерии нервной ткани. Показана биосовместимость и биоактивность данных материалов на модели

МСК. Таким образом, кондуиты ПОБ/Fe_3O_4 перспективны для терапии повреждений нервной системы.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ (проект № 20-63-47096). Выражаем благодарность кафедре биоинженерии МГУ им. М.В. Ломоносова под руководством А.П. Бонарцева за проведение клеточных исследований; Мухортовой Ю.Р. за помощь в синтезе магнетита и Парию И. за проведение измерений АСМ.

1. Behtaj S., Ekberg J. A. K., St John J. A., Pharmaceutics, 14(2), 219 (2022).
2. Shadi H., Bhattacharyya A., and Shanks R., ACS Chemical Neuroscience, 10(8), 3349-3365 (2019).
3. Liu Z., et al., International Journal of Nanomedicine, 12, 7815 (2017).
4. Orkwis J.A., et al., Biomaterials Advances, 140, 213081 (2022).

СТОХАСТИЧЕСКАЯ ДИНАМИКА БЕЛКОВ Rab5/Rab7 В ЭНДОСОМАХ ПОД ВЛИЯНИЕМ МУЛЬТИПЛИКАТИВНЫХ ШУМОВ

Шолохов В. Д.[1], Маковеева Е. В.[1]
[1)] Лаборатория "Стохастический транспорт наночастиц в живом организме", Уральский Федеральный Университет
E-mail: vdsholokhov@yandex.ru

STOCHASTIC DYNAMICS OF Rab5/Rab7 PROTEINS IN ENDOSOMES INFLUENCED BY MULTIPLICATIVE NOISE

Sholokhov V. D.[1], Makoveeva E. V.[1]
[1)] Laboratory of Stochastic Transport of Nanoparticles in Living Systems, Ural Federal University

The influence of multiplicative noise on the dynamics of active Rab5 and Rab7 proteins on the surface of endosomes has been studied. The distribution of pH (Rab5, Rab7) values in endosomes and the proportion of endosomes with pH lesser than the critical value have been obtained.

Исследовано влияние мультипликативного шума на динамику активных белков Rab5 и Rab7 на поверхности эндосом.

Мы сформулировали стохастическую модель преобразования ранних эндосом в поздние эндосомы с влиянием Rab5 на Rab7 [1]. Эта модель состоит из двух стохастических дифференциальных уравнений для уровней белков Rab5 и Rab7 на поверхности эндосом.

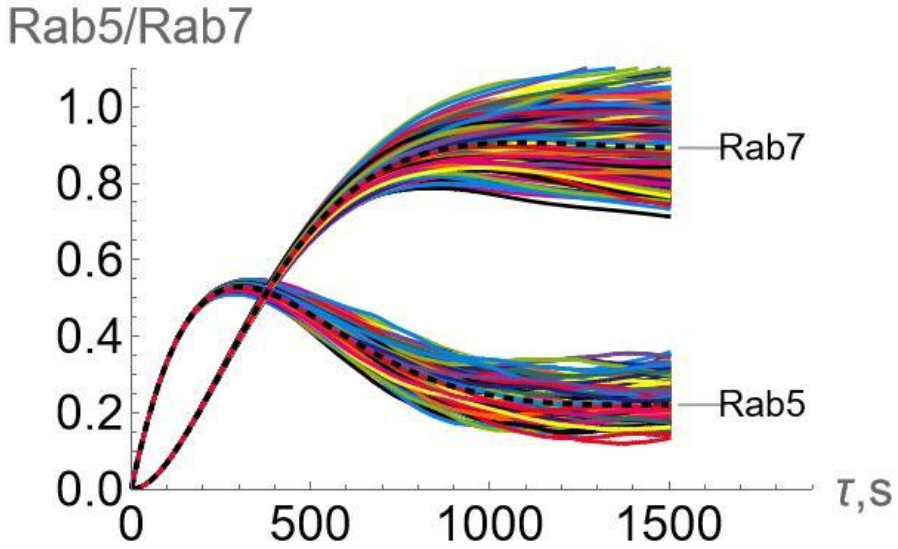


Рис. 1. Динамика уровней белков (Rab5 и Rab7). Черные пунктирные линии показывают детерминированные решения

Численное моделирование показывает, что Rab5 испытывает более быстрый начальный рост по сравнению с Rab7, но последний в конечном итоге подавляет Rab5. Численное моделирование было проведено с помощью Wolfram Mathematics. Результаты показаны на рисунке с 300 смоделированными траекториями. Этот процесс приводит к случайному снижению эндосомального pH и, как следствие, к случайному выходу pH-чувствительных наночастиц и вирусов из эндосом. Получено распределение значений pH в эндосомах и доля эндосом с pH меньше критического значения. Наши численные результаты показывают, что при сравнении мультипликативного и аддитивного шума характерное время выхода наночастиц/вирусов из эндосом короче при мультипликативном шуме [2].

1. M. Castro, G. Lythe, J. Smit, C. Molina-Par´ıs, Sci. Rep. 11, 7845 (2021)
2. S. Fedotov, D. Alexandrov, I. Starodumov, N. Korabel, Mathematics 10, 375 (2022)

ВЛИЯНИЕ pH СРЕДЫ НА МУЛЬТИФЕРМЕНТАТИВНУЮ АКТИВНОСТЬ ДИОКСИДА ЦЕРИЯ

Смольникова Е.Н.[1], Бажукова И.Н.[1], Мышкина А.В.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
E-mail: EN.Smolnikova@urfu.me

EFFECT OF THE pH OF THE MEDIUM ON THE MULTIFERMENTATIVE ACTIVITY OF CERIUM DIOXIDE

Smolnikova E.N.[1], Bazhukova I.N.[1], Myshkina A.V.[1]
[1)] Ural Federal University named after the first president of Russia B.N. Eltsin, Yekaterinburg, Russia

The influence of the hydrogen index of the medium on the multifermentative activity of cerium dioxide nanoparticles has been studied. This work was carried out to determine the optimal parameters of the medium at which the effectiveness of NDC, as an enzyme, is maximal.

Наномедицина — одно из самых перспективных направлений в современной науке. Она подразумевает слежение, исправление, конструирование и контроль над биологическими системами человека, применение технологических возможностей и объектов нанотехнологии с целью диагностики и лечения заболеваний или улучшения биологических функций организма. Основной задачей, стоящей перед нанотехнологиями в медицине, является создание наноматериалов, которые имитируют структуры живого организма, в том числе создание ферментов. Определяющую позицию в разработках занимают нанобиоматериалы на основе диоксида церия (НДЦ). Цикличность между состояниями окисления Ce^{3+} и Ce^{4+}, а также легкий переход между ними на поверхности частиц позволяет НДЦ участвовать в окислительно-восстановительных реакциях, т. е. выступать в роли энзима. Наночастицы получили широкое применение в регуляции всевозможных биологических дисфункций за счет низкой токсичности, высокой биологической активности и способности к регенерации [1].

Однако стоит отметить, что при изучении кинетики ферментативных реакций с использованием наночастиц диоксида церия необходимо учитывать параметры среды для выявления наибольшей эффективности фермента данного вида. Живой организм, в особенности человеческий, очень сложен, разные жидкости биологической системы имеют различные значения pH, поэтому важной проблемой становится оценка сродства фермента к субстрату в средах различной кислотности. Цель данной работы – исследование влияния pH среды на мультиферментативную активность наночастиц диоксида церия.

В настоящей работе использовали наночастицы диоксида церия CeO_2 в мальтодекстриновой оболочке, полученные методом осаждения [2]. Пероксидазную и оксидазную активности наночастиц определяли, используя буферный раствор, содержащий 3,3’,5,5’-тетраметилбензидин (ТМБ) и пероксид водорода H_2O_2.

Продемонстрировано, что в нейтральной среде для НДЦ характерно проявление пероксидазного типа активности. Наблюдается реакция окисления субстрата ТМБ. Кинетика этой ферментативной реакции соответствует модели Михаэлиса-Ментен. При высокой концентрации CeO_2, наночастицы диоксида церия начинают выступать в роли ингибитора реакции, т.е. их пероксидазная активность падает. В кислой среде НДЦ проявляют в большей степени оксидазную активность, причем с уменьшение pH среды данный тип активности увеличивается. Следует отметить, что для НДЦ характерно одновременное протекание двух конкурирующих реакций, в одной из которых наночастицы выступают в качестве пероксидазы, а в другой – оксидазы.

1. Физико-химические свойства и антиоксидантная активность наночастиц оксида церия, стабилизированных мальтодекстрином / С. А. Маслова, И.Н. Бажукова, А.В. Мышкина [и др.] // Физика твердого тела, 2021, том 63, вып.12.- С.2025 - 2026.
2. E.O. Baksheev, M.O. Pronina, M.A. Mashkovtsev, A.V. Myshkina, I.N. Bazhukova, V.V. Kasianova. AIP Conference Proceedings 2174, 020156 (2019).

ВЛИЯНИЕ АМИНОКИСЛОТ НА КРИСТАЛЛИЗАЦИЮ ЖЕЛЧНЫХ КАМНЕЙ В УСЛОВИЯХ, ПРИБЛИЖЕННЫХ К ЧЕЛОВЕЧЕСКОМУ ОРГАНИЗМУ

Степанова А. А.[1], Панова Т. В.[1]
[1)] Омский государственный университет имени Ф. М. Достоевского, г. Омск, Россия
E-mail: 7stepanovaaa@mail.ru

EFFECT OF AMINO ACIDS ON CRYSTALLIZATION OF GALLSTONES IN CONDITIONS CLOSE TO THE HUMAN BODY

Stepanova A. A.[1], Panova T. V.[1]
[1)] Omsk State University named after F. M. Dostoevsky, Omsk, Russia

X-ray phase analysis and IR spectroscopy were used to study the effect of concentration of various amino acids on gallstone formation under conditions close to the human body. It has been found that the main phase in crystallizable solids is the calcite phase.

Желчнокаменная болезнь (ЖКБ) является важной проблемой в современном мире. Данные исследований показывают, что холелитиаз встречается более чем у 10-15% населения планеты. Также отмечается рост заболеваемости среди детей и лиц молодого возраста. Поэтому актуальным является выяснение причин желчнокаменной болезни, в частности влияния различных добавок на процессы кристаллизации желчных камней в условиях, приближенных к человеческому организму.

Известно, что основными параметрами любой минералообразующей среды являются концентрация, температура, давление и pH среды [1]. При нормальных физиологических условиях образование твердой фазы карбоната кальция ($CaCO_3$-основная составляющая желчных камней) не происходит. Поскольку значения индекса пересыщения и свободной энергии Гиббса для нормального состояния системы близки к нулю, сделано предположение о возможности локальных пересыщений в желчи, достаточных для образования и развития твердой фазы при небольшом увеличении концентрации осадкообразующих ионов или снижения pH.

Целью настоящего исследования являлась оценка влияния добавок из аминокислот на процессы кристаллизации карбоната кальция. Синтез карбоната кальция проводился в растворе желчи при добавлении аминокислот различной концентрации. Температура раствора соответствовала температуре человеческого организма, pH поддерживался на уровне 7,25. В качестве аминокислот были взяты цистеин и серин, аспарагиновая и глутаминовая кислоты, участвующие в процессе пищеварения. Рентгенофазовый анализ проводился с использованием дифрактомера ДРОН-3М на медном K_α-излучении. ИК-спектроскопия осуществлялась на спектрофотометре ФСМ-2202.

Рентгенофазовый анализ показал, что преобладающей фазой при кристаллизации твердых осадков для всех используемых в эксперименте добавок является фаза кальцита. При увеличении концентрации цистеина обнаружено возрастание фазы арагонита. Повышение концентрации аспарагиновой кислоты привело к возрастанию фазы ватерита и уменьшению содержания фазы кальцита. Рост концентрации глутаминовой кислоты привел к возрастанию фазы кальцита. При варьировании примеси серина увеличивалась кристаллизация арагонита и ватерита. Анализ ИК-спектров подтвердил данные рентгенофазового анализа. Проводятся исследования формы и размеров образовавшихся кристаллов твердой фазы.

Таким образом, установлено, что при кристаллизации карбоната кальция в условиях приближенных к человеческому организму при варьировании концентрации аминокислот основной фазой твердого осадка является фаза кальцита, содержание которой возрастает при увеличении концентрации глутаминовой кислоты.

1. Кристаллогенезис в организме человека: монография / О. А. Голованова. – Омск: Издательство Омского государственного университета, 2022. – с. 49, 56-57.

РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ СОЗДАНИЯ СОЛНЕЧНЫХ БАТАРЕЙ, СЕНСИБИЛИЗИРОВАННЫХ ОРГАНИЧЕСКИМИ КРАСИТЕЛЯМИ

Таланкина Л.М.[1], Аюпова А.В.[1], Низамова А.Р.[1], Демина Н.С.[2], Бажукова И.Н.[1]
[1)] Уральский Федеральный Университет
[2)] Институт органического синтеза УрО РАН им. И.Я. Постовского
E-mail: lida.paltseva1@gmail.com

TECHNOLOGY FOR CREATING SOLAR CELLS SENSITIZED WITH ORGANIC DYES

Talankina L.M.[1], Ayupova A.V.[1], Nizamova A.R.[1], Demina N.S.[2], Bazhukova I.N.[1]
[1)] Ural Federal University
[2)] Institute of Organic Synthesis Ural Branch of the Russian Academy of Sciences named after I.Ya. Postovsky

Recently, a lot of attention has been paid to alternative energy sources. Research is being actively conducted in the field of converting solar energy into electricity, which involves the development of cheap and efficient solar cells. This work is devoted to the study of dye-sensitized solar cells.

В настоящее время одной из важных потребностей человечества является энергия, необходимость в которой растет с каждым днем, что в дальнейшем может привести к энергетическому кризису. Использование невозобновляемых источников энергии неизбежно приводит к загрязнению окружающей среды. В последнее время все больше внимания уделяется альтернативным источникам энергии, как более экологически чистым и перспективным. В связи с этим активно проводятся исследования в области преобразования солнечной энергии в электричество, которые предполагают разработку дешевых и эффективных фотоэлементов. Одним из наиболее успешных направлений, связанных с возобновляемыми источниками энергии, является создание сенсибилизированных красителем солнечных батарей (DSSC). Эти солнечные элементы изобретены профессором М. Гретцелем в 1991 году и является наиболее перспективным и недорогим способом сбора солнечного излучения. Это обусловлено простотой структуры, прозрачностью, гибкостью, низкой себестоимостью производства, а также широким диапазоном возможных применений. Несмотря на эти преимущества, данные устройства характеризуются низкой эффективностью по сравнению с кремниевыми солнечными батареями, что ограничивает их коммерческую реализацию. Таким образом, необходимо детальное исследование особенностей изготовления солнечных батарей на основе органических красителей.

Данная работа посвящена разработке технологии изготовления DSSC-устройства и исследованию их фотоэлектрических характеристик. В работе использовались тиено[3,2-b]индольные красители, коммерчески доступные нанопорошки TiO_2 [1].

1. Steparuk A. S. et al. Performance evaluation of dye-sensitized solar cells (DSSCs) based on metal-free thieno [3, 2-b] indole dyes //Journal of Materials Science: Materials in Electronics. – 2022. – Т. 33. – №. 9. – С. 6307-6317.

ВЫЯВЛЕНИЕ НАРУШЕНИЙ ГОЛОСА С ПРИМЕНЕНИЕМ ТЕХНОЛОГИЙ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Целищева А.В.[1], Смирнов А.А.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина, Физико-технологический институт, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: a.celishevan14@gmail.com

VOICE DISORDER IDENTIFICATION USING MACHINE LEARNING TECHNOLOGIES

Tselishcheva A.V.[1], Smirnov A.A.[1]
[1)] Ural Federal University named after the First President of Russia B. N. Yeltsin, Institute of Physics and Technology, Yekaterinburg, Russia

In this report, the improvement of the existing method of processing input data in the detection of voice disorders using machine learning technologies was examined.

Современные технологии машинного обучения стали незаменимым инструментом во многих областях, включая медицину. Одним из примеров этой тенденции в медицине является применение разработанных с помощью технологий машинного обучения программ для диагностики нарушений голоса.

Нарушения голоса могут быть вызваны различными причинами, от простуды и инфекций до более серьезных заболеваний, таких как опухоли и болезни нервной системы. Для обнаружения таких нарушений требуется точная и эффективная методика анализа голоса.

В этой работе рассмотрена разработанная авторами ранее модель для идентификации нарушений голоса. Для улучшения показателей модели необходимо модифицировать исходные данные, чему и посвящен этот отчет.

Полученные результаты показали, что применение технологий машинного обучения может улучшить точность диагностики нарушений голоса и ускорить процесс обработки данных. Это может существенно повысить эффективность обследования пациентов и улучшить качество диагностики и лечения нарушений голоса.

1. X. Zhang, L. Zhang, Z. Tao, H. Zhao, Acoustic Characteristics of Normal and Pathological Voices Analysis and Recognition. ICSAE 2019

ВОЗМОЖНОСТИ ПРИМЕНЕНИЯ ИОНИЗИРУЮЩЕГО ИЗЛУЧЕНИЯ В КОСМЕТОЛОГИИ НА ПРИМЕРЕ СКРАБОВ

Ужнева В.А.[1], Баранова А.А.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина
E-mail: uzh.va@yandex.ru

THE POSSIBILITY OF USING IONIZING RADIATION IN COSMETOLOGY ON THE EXAMPLE OF SCRUBS

Uzhneva V.A.[1], Baranova A.A.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

In this work, we study the influence of beta radiation in the dose of 10 kGy on some physicochemical properties of cream and scrubs, the effectiveness in preserving contaminated abrasive particles (coffee and walnut shells). The production process is presented using 2 types of electron accelerators.

Косметика, в частности, уходовая является одним из наиболее важных потребительских товаров, её популярность подтверждается многомиллионными оборотами на мировом рынке. Примером такой продукции являются скрабы - они тщательно очищают кожу не только от ороговевшего слоя эпидермиса, но и от различных поверхностных загрязнений [1]. Следует подчеркнуть, что всё большую популярность набирают полностью натуральные продукты, которые вбирают в себя всю пользу активов, в них нет ароматизаторов, красителей и синтетических наполнителей. Более того, они могут использоваться и приготавливаться в домашних условиях.

С развитием радиационных технологий появилась возможность использования ионизирующего излучения, позволяющего конкурировать с существующими методами обработки: физическими (использование высоких температур или УФ-излучения) и химическими (использование химических составов и консервантов) [2].

При радиационной обработке не происходит изменения температуры, уничтожаются патогенные микроорганизмы без значительного воздействия на сам продукт. Однако, имеется существенный недостаток - не все фармацевтические и косметические продукты обладают достаточной стойкостью к дозам облучения, необходимым для получения требуемого эффекта стерилизации или пастеризации, что влечет к дополнительным исследованиям по выбору оптимального интервала доз, не приводящих к изменению органолептического состава косметического продукта [3].

В данной работе рассматривается влияние ионизирующего излучения дозой 10 кГр на потребительские (физико-химические и физические) свойства крема и

приготовленных скрабов из жмыха кофе и скорлупы грецких орехов, эффективность такой обработки для сохранения уже зараженных абразивных частиц, а также сравниваются производственные процессы с использованием разных ускорителей электронов как вариант практического применения данной технологии производителями косметических средств.

Эксперименты проводились согласно существующим методикам: ГОСТ 29188.4-91, ГОСТ 29188.2-91 и ГОСТ 29188.3-91, анализировались согласно нормативной документации с учетом визуального осмотра. Дополнительно проведено моделирование и расчет пробега электронов в среде абразива и других дозовых характеристик при энергии 10 МэВ в программном обеспечении PC-Lab с целью определения максимально допустимых для качественной обработки размеров тары с абразивными частицами.

Выявлено, что обработка пучком электроном при микробном обсеменении продукта эффективна при дозах свыше 20 кГр. В зависимости от пожеланий производителя в работе представлен технологический регламент обработки готовой продукции с учетом производственных условий. Для ускорителя УЭЛР программно промоделирован процесс обработки и рассчитан пробег электронов в двух средах из разных абразивных частиц.

Поставленная серия экспериментов по изменению физических и физико-химических свойств основы и готового скраба после радиационной обработки показала полное соответствие продукта нормативной документации.

1. О.Ю. Кузнецова. Разработка и исследование космецевтических средств с биологически активными композициями чаги. 1. Аппликационные лекарственные средства. Мыла. Скрабы. Вестник Казанского технологического университета 17 (10) (2014).
2. КоролевФарм. Промышленная гигиена в косметическом секторе [Электронный ресурс] URL: https://www.korolevpharm.ru/dokumentatsiya/spravochnye-materialy/promyshlennaya-gigiena-v-kosmeticheskom-sektore.html (дата обращения 23.12.2021).
3. Bryl-Sandelewska T. Radiation treatment of pharmaceutics, raw materials for medical use and cosmetics. Obrobka radiacyjna lekow, surowcow o przeznaczeniu medycznym oraz kosmetykow (1993).

ОПТИМИЗАЦИЯ ПЛАНИРОВАНИЯ ДИСТАНЦИОННОЙ ЛУЧЕВОЙ ТЕРАПИИ С ПОМОЩЬЮ ФУНКЦИИ gEUD

Вечтомова А.Д.[1], Баянкин С.Н.[2]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
[2)] Свердловский областной онкологический диспансер, Екатеринбург, Россия
E-mail: Vechtomowa.A4@yandex.ru

OPTIMIZATION OF DISTANT RADIOTHERAPY PLANNING BY THE gEUD FUNCTION

Vechtomova A.D.[1], Bayankin S.N.[2]
[1)] Ural Federal University named after the First President of Russia B. N. Yeltsin, Ekaterinburg, Russia
[2)] Sverdlovsk Regional Oncology Dispensary, Ekaterinburg, Russia

The use of the generalized equivalent uniform dose (gEUD) function is promising approach for radiotherapy planning. The aim of the study is to evaluate gEUD-optimization of radiation therapy planning for prostate cancer and head and neck cancer.

Дозиметрическое планирование лучевой терапии при лечении злокачественных опухолей осуществляется для того, чтобы близлежащие к опухоли ткани и органы были подвергнуты как можно меньшему воздействию без ущерба для дозы целевого объёма. На данный момент для достижения этой цели перспективным является использование радиобиологической целевой функции оптимизации gEUD (generalized equivalent uniform dose – обобщённая эквивалентная однородная доза) [1].

Функция gEUD зависит от описывающего объёмный эффект параметра a, в зависимости от значения которого она по-разному воздействует на распределение дозы и разделяется на три промежутка:

1) Target gEUD: при a от 1 до -40 gEUD работает в области низких доз.

2) Lower gEUD: при a = 1 gEUD работает в области средних доз.

3) Upper gEUD: при a > 0 (до 40) gEUD работает в области высоких доз и используется для здоровых тканей.

Цель данной работы состояла в оценке оптимизации планирования дистанционной лучевой терапии с помощью функции gEUD для рака предстательной железы и рака головы и шеи.

Эксперимент был проведён в планирующей системе Eclipse для интенсивно моделированной терапии двух клинических случаев: IMRT (intensity modulated radiation therapy) и VMAT (volumetric modulated arc therapy) рака предстательной железы и для VMAT рака головы и шеи с одновременным интегрированным бустом. Параметр a Target gEUD и Lower gEUD варьировался для мишеней (a = 1; -0,1; -1; -10; -20; -30; -40) и Upper gEUD для прямой кишки и мочевого пузыря

и для спинного мозга и околоушных желез (a = 0,1; 1; 10; 20; 30; 40) – каждому значению параметра a соответствует отдельный план.

В ходе анализа всех планов были получены следующие результаты:

1. gEUD-оптимизация IMRT рака предстательной железы вызвала существенное снижение дозы мишени.

2. В результате изменения a от 1 до -40 Target gEUD для VMAT рака предстательной железы, максимальная доза мишени повысилась с 104,4% до 108,3%, минимальная – снизилась с 89,4% до 85,7%. Для Lower gEUD получено снижение гетерогенности с 1,47 до 1,14, повышение минимальной дозы с 71,4% до 92,1%.

3. Для Target gEUD рака головы и шеи было получено повышение максимальной и минимальной доз мишени на несколько процентов. Для Lower gEUD – снижение гетерогенности (с 1,99 до 1,38 для мишени; с 1,43 до 1,28 для буста), повышение минимальной дозы на 21% для мишени и на 7,8% для буста.

4. Увеличение a от 1 до 40 Upper gEUD во всех рассмотренных планах привело к снижению максимальной дозы критических органов (прямая кишка – 18,1%, мочевой пузырь – 17,8%, спинной мозг – 22,5%, околоушные железы – 33,3% (правая) и 47,1% (левая)). Однако, одновременно с этим по мере увеличения значения параметра a, снижалась доза мишени, а также повышалась гетерогенность её распределения. Был сделан вывод о том, что для оптимального выбора значения параметра a необходимо находить компромисс между снижением дозы критических органов и ухудшением дозового распределения мишени.

1. Niemierko A. A Generalized Concept of Equivalent Uniform Dose (EUD). Medical Physics, 26, 1100 (1999).

BIOLOGICALLY ACTIVE SUBSTANCES FROM MICROORGANISMS

Ibn-Wuni I.[1], Ivantsova M.N.[1]
[1)] Institute of Chemical Engineering, Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia
E-mail: ibnwuni29@gmail.com

Food is a necessary component for the sustenance of all life, hence it is necessary to consume more than just a balanced diet. Biologically active foods that can help our bodies remove toxins or stop the development of some chronic diseases.

All living things must modify their biochemical and physiological processes to cope with the ongoing changes in their environment. Numerous processes of adaptation to the action of abiotic, biotic, and anthropogenic stimuli specify distinctive traits of plants in the synthesis of bioactive chemicals, which are food additives that affect the physiological or cellular activities of people or other animals who consume them.[1]. In contrast, stabilizers and bulking agents are frequently used in cosmetics. Some bioactive compounds that may prevent diseases like cancer, atherosclerosis, cataracts, multiple sclerosis, and cardiovascular diseases have also been linked to an important role in lipid regulation and antioxidant and antiinflammatory activity. They consist of plant sterols, carotenoids, tannins, betalains, anthocyanins, flavonoids, and glucosinolates.[2]. Normally, these substances that are found in nature—in plants, fruits, animals, and microorganisms—have been chemically synthesized; however, recent restrictions on the use of chemically synthesized bioactive substances as food additives or in functional cosmetics have increased interest in obtaining them from natural sources. However, due to the beneficial effects in human health, alternative ways of producing larger and more specific amounts have been developed, in which production using microbiologic techniques has an important role. To create compounds with added value, microorganisms such as fungi, bacteria, yeast, and microalgae have been used [3], and solid-state bioprocesses using agro-industrial waste have been studied. Employing microorganisms for the production of added-value products appears to be a very relevant tool for the pharmaceutical, chemical, and food industries, including the production of complex materials like proteins, nucleic acids, polysaccharides, and even cells, down to low-molecular weight molecules possessing biological activities. Some of these compounds are synthesized naturally from a wide variety, including molecules like pigments, oligosaccharides, and other molecules.[4].

Most significantly, flavonoids provide anti-inflammatory, antioxidant, and cardiovascular health advantages in addition to anti-cancer capabilities. Anthocyanins have beneficial impacts on cardiovascular health, while more research is needed. In addition to improving vision and the skin, carotenoids can protect against certain malignancies. Glucosinolates contain anti-cancer and anti-dementia properties. The literature on the effects of various bioactive substances on human health, however, varies greatly, necessitating more study and clarification in order to maximize any health advantages.[5].

1. Revutska, A., Belava, V., Golubenko, A., Taran, N., & Chen, M. (2021). Plant secondary metabolites as bioactive substances for innovative biotechnologies. E3S Web of Conferences, 280, 07014. https://doi.org/10.1051/e3sconf/202128007014
2. Cardenas-Toro, F. P., Alcázar-Alay, S. C., Coutinho, J. P., Godoy, H. T., Forster-Carneiro, T., & Meireles, M. A. A. (2015). Pressurized liquid extraction and low-pressure solvent extraction of carotenoids from pressed palm fiber: Experimental and economical evaluation. Food and Bioproducts Processing, 94, 90–100. https://doi.org/10.1016/J.FBP.2015.01.006
3. Demain, A. L. (2000). Microbial biotechnology. Trends in Biotechnology, 18(1), 26–31. https://doi.org/10.1016/S0167-7799(99)01400-6
4. Hernández-Almanza, A., Muñiz-Márquez, D. B., De La Rosa, O., Navarro, V., Martínez-Medina, G., Rodríguez-Herrera, R., & Aguilar, C. N. (2017). Chapter 4 - Microbial Production of Bioactive Pigments, Oligosaccharides, and Peptides. Food Biosynthesis, 95–134. https://doi.org/10.1016/B978-0-12-811372-1.00004-X
5. Walia, A., Kumar Gupta, A., & Sharma, V. (2019). Role of Bioactive Compounds in Human Health. Acta Scientific Medical Sciences (ISSN: 2582-0931), 3(9), 25–33.

ЙОГУРТ С МНОГОКОМПОНЕНТНОЙ РАСТИТЕЛЬНОЙ ДОБАВКОЙ

Журавлева Д.А.[1], Селезнева И.С.[1]
[1)] Уральский федеральный университет
E-mail: d.a.zhuravleva@urfu.ru

YOGURT WITH A MULTICOMPONENT VEGETABLE SUPPLEMENT

Zhuravleva D.A.[1], Selezneva I.S.[1]
[1)] Ural Federal University

The composition and thermostatic yoghurt technology obtaining with a multicomponent vegetable additive have been developed. The quality control of yoghurt samples organoleptic, physicochemical and microbiological parameters was carried out, and their nutritional and biological value was determined.

Влияние молочных продуктов на здоровье человека уже многие десятилетия является предметом обширных исследований. Пищевая ценность кисломолочных продуктов определяется их питательным составом и матричной структурой, которая повышает биодоступность и усвояемость питательных веществ. Ферментацией молока молочнокислыми бактериями видов Lactobacillus bulgaricus и Streptococcus thermophilus получают йогурт – продукт с оптимальной матричной структурой, обеспечивающей высокую усвояемость белка, а также витаминов и минералов [1,2]. При этом известная технология производства термостатного йогурта дает возможность получить обогащенные биологически активными компонентами продукты функциональной направленности [3]. С целью разработки рецептуры и технологии получения йогурта функциональной направленности, обогащенного растительными компонентами было изучено применение порошка свекольного сока в комбинации с овсяным бета-глюканом. Использование свеклы в технологии производства йогурта позволяет обогатить кисломолочные продукты пищевыми волокнами, клетчаткой и пектинами, необходимыми для нормализации работы ЖКТ [4]. Не смотря на то, что овсяный бета-глюкан не имеет пищевой ценности для человека, он легко усваивается микробиотой кишечника, что также нормализует работу ЖКТ. Наряду с этим полисахарид меняет состав и количество желчных кислот, что в свою очередь приводит к снижению абсорбции экзогенного холестерина в организме человека и уменьшает его всасывание [5].

В результате работы термостатным способом получили образцы йогурта, обогащенные многокомпонентной растительной добавкой, содержащей порошок свекольного сока, овсяный бета-глюкан в различных соотношениях. Для улучшения органолептических показателей кисломолочного продукта добавили зелень базилика сушеного. При проведении исследований найден оптимальный

состав многокомпонентной растительной добавки и составлена рецептура обогащенного йогурта функциональной направленности. Изучены органолептические, физико-химические и микробиологические характеристики йогурта на 1 и 7 сутки хранения. Установлено, что все показатели качества соответствуют требованиям ГОСТ 31981-2013 Йогурты. Общие технические условия.

На способ получения йогурта с многокомпонентной растительной добавкой подана заявка на оформление патента в Федеральный институт промышленной собственности (ФИПС).

РИД получен при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Программы развития Уральского федерального университета имени первого Президента России Б.Н. Ельцина в соответствии с программой стратегического академического лидерства "Приоритет-2030".

1. Sharon M Donovan, Olivier Goulet, Advances in Nutrition, Vol. 10, Issue 5, 913-916 (2019).
2. Savaiano D.A., Hutkins R.W., Nutr Rev, 79, 599-614 (2021).
3. Hadjimbei E., Botsaris G., Chrysostomou S., Еда, 11 (2022).
4. Наумкин В. Н., Коцарева Н. В., Манохина Л. А. [и др.], Пищевые и лекарственные свойства культурных растений: учебное пособие, Лань (2021).
5. Skendi A., Biliaderis C. G., Lazaridou A. [et. al.], Journal of Cereal Science, Vol. 38, 15-31 (2003).

СЕКЦИЯ 8

ИННОВАЦИИ И СОЦИАЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

ИССЛЕДОВАНИЕ РОЛЕВЫХ МОДЕЛЕЙ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ВУЗА И ИНДУСТРИАЛЬНОГО ПАРТНЕРА В СФЕРЕ ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОЙ СОБСТВЕННОСТИ

Александрова А.С.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
E-mail: a-alexandrova@mail.ru

RESEARCH OF ROLE MODELS OF INTERACTION BETWEEN A UNIVERSITY AND AN INDUSTRIAL PARTNER IN THE FIELD OF INTELLECTUAL PROPERTY

Aleksandrova A.S.[1]
[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia B. N. Yeltsin., Yekaterinburg, Russian Federation

The article systematizes the existing role models of interaction between the university and the industrial partner in the field of intellectual property, as well as the corresponding schemes of division and consolidation of intellectual rights.

В последнее время постоянно возрастает интерес к сфере интеллектуальной собственности, особенно в направлении развития стратегий управления интеллектуальной собственностью в различных организациях, а также механизмов реализации данных стратегий. У предприятий повышаются потребности в инновациях, поскольку на современном глобальном рынке существует довольно жесткая конкуренция, которая предполагает развитие механизмов, позволяющих осуществить более удобную, совершенную и современную передачу знаний из научной сферы в промышленность. В научной сфере проводятся научно-исследовательские и опытно-конструкторские работы, которые позволяют через промышленность довести результаты до материализованного рыночного продукта и удовлетворить запросы потребителя.

Таким образом, организации реального сектора экономики и высшие учебные заведения (вузы) выступают в качестве партнеров при создании интеллектуальной собственности.

Взаимодействие вузов и организаций реального сектора экономики (далее – предприятий) сейчас довольно активно обсуждается в работах российских и зарубежных авторов. Методологическим основам управления интеллектуальной собственностью вузов и предприятий, в том числе при их взаимодействии посвящены, в частности, работы Шульгина Д.Б. [1], Борисоглебской Л.Н. и Лебедевой Я.О. [2], Кирилловой Е.А. [3], Салицкой Е.А. [4], Павловой Е.А. и Нгуен Т.Т.Х. [5] и многих других авторов.

В литературе также упоминаются модели взаимодействия вузов и предприятий с точки зрения распределения ролей. Традиционно используется ролевая модель «заказчик-исполнитель», по которой распределение прав между сторонами определяется договором: права переходят к заказчику. Однако в последнее время наиболее актуальным взаимодействием вуза и предприятий является ситуация, в которой вуз также выступает в качестве инвестора и/или имеет свои разработки ещё до проведения НИОКР, причем такие разработки могут быть использованы при дальнейшем проведении НИОКР и взаимодействии двух сторон при создании интеллектуальной собственности. В данном случае предприятия продолжают рассматривать вуз только в качестве исполнителя и тогда пересекаются интересы вуза и предприятия, за счет чего возникает проблема при распределении прав на созданную интеллектуальную собственность и конкуренция в части коммерциализации данной интеллектуальной собственности.

Настоящая статья призвана систематизировать существующие ролевые модели взаимодействия вузов и организаций реального сектора экономики, а также соответствующие им схемы разделения и закрепления прав.

1. Шульгин Д.Б. Теоретико-методологические основы управления интеллектуальной собственностью как стратегическим ресурсом инновационного развития системы "вуз - предприятие": автореф. дис. д-р. экон. наук наук: 08.00.05. - Санкт-Петербург, 2010. - 42 с
2. Борисоглебская Л.Н., Лебедева Я.О., Михайлов В.Н. Открытое стратегическое партнерство предприятий и вузов: механизмы управления интеллектуальной собственностью при реализации совместных инновационных проектов // Инновации. - 2017. - №1 (219). - С. 53-57
3. Кириллова Е.А. Сравнительный анализ основных тенденций взаимодействия организаций науки и образования с промышленными предприятиями // Управленческие науки. - 2021. - №4, с. 86-98
4. Салицкая Е.А. Проблемы формирования и развития системы управления интеллектуальной собственностью в российских вузах // Управление наукой и наукометрия. - 2015. - №17, с. 225-240
5. Павлова Е.А., Нгуен Т.Т.Х. Управление процессом трансфера технологий при взаимодействии вузов и бизнеса // Экономика и экологический менеджмент. - 2022. - № 3, с. 110-118

УЧЕТ КОГНИТИВНЫХ ИСКАЖЕНИЙ В СИСТЕМЕ УПРАВЛЕНИЯ ИННОВАЦИЯМИ

Антонов П.С.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина
E-mail: Pavlodar7402@gmail.com

ACCOUNTING FOR COGNITIVE DISTORTIONS IN THE INNOVATION MANAGEMENT SYSTEM

Antonov P.S.[1]
[1)] The Ural Federal University named after the first President of Russia B. N. Yeltsin

The paper considers the problem of taking into account the influence of cognitive distortions on decision-making in an innovative project. The main groups of cognitive distortions, their types, causes of occurrence and ways to identify them in the expert are identified.

В работе рассмотрена проблема учёта влияния когнитивных искажений на принятие решений в инновационном проекте. Выявлены основные группы когнитивных искажений, их виды, причины появления и способы их выявления у эксперта.

Современное инновационное развитие России характеризуется наличием большого числа научно-технических разработок, что определяет необходимость принятие управленческих решений на всех стадиях инновационной деятельности. Проведенное исследование показало, что многие авторы трактуют данный процесс, как результат управленческой деятельности, направленный на выбор наиболее эффективного варианта решения проблемы из возможных. Без учета человеческой ограниченной рациональности, подходить к управленческой деятельности рискованно из-за угрозы возникновения когнитивных искажений, которые рассматриваются как преувеличенная или иррациональная модель мышления, связанная с возникновением и увековечением психопатологических состояний.

Существует несколько подходов к понятию инновационной деятельности. Прежде всего это трансформация идей в новые или усовершенствованные продукты, услуги. В случае создания инноваций за счет заимствования технологий данное понятие может рассматриваться как процесс реализации инновационных проектов, где система принятия решений основывается на статистических, аналитических и экспертных методах. При опросе специалистов в области проектного управления большинство отметило применение экспертных методов, особенно на начальных этапах работы.

Экспертный подход в системе управления инновациями имеет ряд ограничений и недостатков. Примером является иррациональный подход, а также субъективность, усреднение мнений.

Анализ специальной литературы и проведение глубинных интервью со специалистами показал, что в процессе принятия решений в инновационной деятельности необходимо учитывать когнитивные искажения (КИ). Различают три группы КИ: эвристические, оптимистические и обрамляющие.

Когнитивные искажения в управленческом процессе связаны с человеческой природой. Наиболее важными являются: склонность к доступной информации (предвзятость подтверждения), ошибка базового процента, пре-увеличение вероятности частных случаев, регрессия к среднему значению, ошибка конъюнкции, неприятие потери, эффект владения, ментальный учет и многие другие. Данные зарубежных исследований когнитивных искажений дают понять, что 98% ошибок было совершено под действием КИ.

Таким образом, на основании проведенного исследования можно сделать вывод, что в системе управления инновациями необходимо учитывать три основных группы когнитивных искажений. Использование экспертных методов на начальных этапах реализации инновационного проекта определяет критический уровень рисков когнитивных искажений. С целью выявления и снижения КИ на человека необходимо применять различные тренинги, включающие в себя провокацию КИ, осознание, оценку направления и силы искажения, выбор подхода и работа над искажениями.

1. Э.Р. Кашапова, М.В. Рыжкова, Когнитивные искажения и их влияние на поведение индивид;а Вестник Томского государственного университета. Экономика. 2015. №2 (30).
2. Проблема когнитивных искажений при оценке рисков и принятии инновационных решений, Бажанов В.А., Гондаренко М.В., 2012
3. Бешелев С. Д. Гурвич Ф. Г. Экспертные оценки в принятии плановых решений. Серия: Библиотечка хозяйственного руководителя М. Экономика 1976г. 78 с.
4. Atsuo Murata, Statistics of a variety of cognitive biases in decision making in crucial accident analyses, Atsuo Murata, Haruka Yoshimura. 6th International Conference on Applied Human Factors and Ergonomics (AHFE 2015) and the Affiliated Conferences, AHFE 2015.
5. Канеман и Тверски. Принятие решений в условиях неопределенности: правила и предубеждения. URL: https://d-shagardin.livejournal.com/92111.html

МОТИВАЦИЯ ДОБРОВОЛЬЦЕВ В УСЛОВИЯХ ПРЕЕМСТВЕННОСТИ

Белов А.А.[1]
[1)] Волонтерский центр "Волонтеры Урала"
E-mail: fortoha@gmail.com

VOLUNTEERS MOTIVATION IN TERMS OF CONTINUITY

Belov A.A.[1]
[1)] Volunteer Center "Volunteers of Urals"

Continuity is considered as part of the volunteer's activity value level, as well as its impact on the volunteer's motivation.The continuity of volunteerism in Ekaterinburg is analyzed from different points of view: volunteerism at various educational levels, managerial decisions in the organization

Добровольческая деятельность - одно из направлений, в котором себя и свои силы могут попробовать активисты. Сейчас в стране около 15 сфер волонтерства. Добровольчество стало продуктивным социальным институтом по решению проблем замотивированными, активными гражданами, которые не ждут оплаты за свой вклад и развивают территории на добровольной основе. Волонтерство в университетах – уже не просто инструмент воспитания поколений, а нечто большее, эффективная методика, которая позволяет развивать из неопытных первокурсников квалифицированных и профессиональных специалистов. Адаптация в студенческую среду, развитие компетенций – как профессиональных (методика «обучение служением»), так и надпрофессиональных (стрессоустройчивость, управление проектами, экологичность эмоций), социальная ответственность и повышение социальной активность – малый спектр задач, которые решаются посредством добровольчества.

Рассуждая о добровольчестве как процессе развития, хочется акцентировать внимание на термине преемственности, который обозначает последовательное развитие. Статус преемственности в добровольчестве пока, что вызывает вопросы у исследователей, и к единому мнению на значимость этого принципа ученые не пришли. Преемственность – основополагающий принцип, который отражает передачу и усвоение социальных и культурных ценностей от поколения к поколению. В специфике добровольчества преемственность можно раскрыть как передачу опыта, практик и инструментов, которые были наработаны активистами волонтерского центра, через поколения волонтеров. Таким образом, среди составляющих и критериев развития добровольчества преемственность выступает той внутренней основой, которая обусловливает интегральность, целостность и направленность процесса развития.

В контексте хотелось бы отметить, что преемственность является частью добровольчества и как ценность (опыт реализации волонтерских программ в проектах трансформируется на основе опыта предыдущих поколений), и как дидактический принцип (компетенции профессиональные и надпрофессиональные формируются постепенно с учетом норм преемственности, о которых говорилось выше).

Анализ процессной деятельности волонтерского центра «Волонтёры Урала» с создания центра до настоящего времени выявил практики, методики и инструменты, которые используются для закрепления опыта организации волонтерских программ на крупных международных событиях (чек-листы, методические материалы, база знаний, образовательные программы) и передачи данного опыта следующим поколениям волонтеров (система роста в организации). Данная система деятельности не была выбрана случайно, а сформировалась с течением лет, трансформируясь под внешними вызовами и внутренними потребностями. Опыт, полученный по результатам реализации волонтерской программы на проектах, рефлексируется и учитывается при организации следующего мероприятия и реализации мотивационных программ, создавая систему преемственность между поколениями волонтеров, которые сменяют друг друга.

1. Доклад «Основные итоги деятельности Министерства образования и молодежной политики Свердловской области в 2021 году и задачи на 2022 год» // Министерство образования и молодежной политики Свердловской области URL: https://minobraz.egov66.ru/upload/minobr/files/84/77/847785a79b85de970e06de46dc4ec260.pdf
2. Справка об истории создания и развития ВЦ // DOBRO.RU URL: https://dobro.ru/organizations/27/documents
3. Козель, В. Н. Событийное волонтерство как технология вовлечения горожан в системную волонтерскую деятельность : методическое пособие. М: изд-во ГБУ города Москвы «Мосволонтер», 2018, 98 с.
4. Килина А.Г., Кондаранцева К.А. Путеводитель по миру волонтерства : методическое пособие. М: изд-во ГБУ города Москвы «Мосволонтер», 2018, 113 с.
5. Рябова М. А. Событийное волонтерство в России: особенности мотивации волонтеров крупных спортивных событий / М. А. Рябова // Научные достижения и открытия современной молодежи: сб. ст. победителей междунар. науч.-практ. конф.: в 2 ч. / Отв. ред. Г.Ю. Гуляев; Академия МНЭПУ.— Пенза: Наука и Просвещение, 2017.— Ч. 1.— С. 1508–1511

МОТИВАЦИЯ ВОЛОНТЕРОВ СОБЫТИЙНОГО ДОБРОВОЛЬЧЕСТВА

Белов А.А.[1], Бондарева А.Ю.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина
E-mail: anastasia.bondareva@urfu.ru

MOTIVATION OF EVENT VOLUNTEERING VOLUNTEERS

Belov A.A.[1], Bondareva A.Yu/[1]
[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin

Цель исследования – выявить мотивацию кандидатов в волонтеры международного события. В исследовании были изучены анкеты кандидатов в волонтеры Единых игр Специальной Олимпиады в Казани. Полученные результаты исследования могут стать основой для разработки программы работы с волонтерами и совершенств

Введение

Добровольчество в современном российском обществе – уникальное явление. На данный момент добровольческой деятельностью активно занимаются люди разных возрастов, профессий, проживающие в городах и селах. В российской науке существуют исследования мотивации добровольцев крупных международных событий, но нет сравнений мотивации добровольцев крупнейших спортивных событий в России. За 10 лет активного развития событийного добровольчества в России сменилось несколько поколений добровольцев. Первыми стали добровольцы Всемирной летней Универсиады 2013 года в Казани и Олимпийских игр 2014 в Сочи. Далее – добровольцы Чемпионата мира по футболу 2018 в России.

Результаты исследования могут использоваться при разработки комплексной программы по работе с волонтерами, повышения компетентности волонтеров при выполнении своих задач во время подготовки и организации крупнейших международных событий. Также результаты исследования будут использования для разработки плана коммуникации с потенциальными кандидатами в волонтеры.

Методы и материалы

Эмпирической базой исследования являются результаты интервью кандидатов в волонтеры Единых игр Специальной олимпиады в Казани, проживающих на территории Свердловской и подавших заявки. Всего было проведено 105 интервью с кандидатами в волонтеры. Кандидатами в волонтеры были жители города Екатеринбург и Свердловской области. При обработке результатов интервью был изучен вопрос мотивации участия в событии. Все кандидаты были разделены по трем показателям: возраст, пол, место проживания

(город Екатеринбург или Свердловская область). Предложенные варианты ответов были классифицированы исходя из Стандарта событийного волонтерства Ассоциации волонтерских центров [1].

Результаты и обсуждения

Исходя из результатов исследования можно сделать вывод, что основным мотивом в волонтерской деятельности для кандидатов в волонтеры волонтерство является путешествие и возможность посетить новое место (22 человека). Следующим мотивом необходимо отметить – процессный (20 человек). Кандидаты в волонтеры желают стать частью события. Идейный мотив высказали 16 человек, именно они хотят внести максимальный вклад в мероприятие. Немного меньше заинтересованы кандидаты в социальном мотиве (быть полезным для общества), 14 человек. 10 человек желают получать бонусы за осуществление добровольческой деятельности.

Заключение

Таким образом, благодаря изучению мотивации участия кандидатов в волонтеры, организаторы добровольческой деятельности могут разработать программы работы с волонтерами с учетом их интересов, что будет способствовать повышению их мотивации к участию в волонтерской деятельности.

1. Н. Горлова, И. Суркова, А. Фельдман, С. Черемшанов, И. Ширшова, А. Губина, Г. Папазян, А. Метелев Стандарт событийного волонтерства . - М.: Издательство Ассоциации волонтерских центров, 2020. - 223 с.

МОДЕЛЬ ИННОВАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В ЛОГИСТИЗАЦИИ

Давлетова Е.Э.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: keisi_cher@mail.ru

MODEL OF INNOVATIVE PROCESSES IN LOGISTIZATION

Davletova E.E.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The study analyzes the actual problems of the logistics business processes of trade enterprises. A survey of respondents allows you to identify the most significant problems and get their development according to the method.

С каждым годом инновационная продукция все чаще и чаще появляется на рынке. Изобретатели создают и выпускают огромное количество новых товаров и услуг, способных удовлетворить разного рода человеческие потребности. Количество разнообразных товаров увеличивается, расширяется и ассортимент. В связи с увеличением объема продукции возникают проблемы в закупочной деятельности, хранении, поставке, реализации.

Инновационная логистика – это то, что позволит многим предприятиям выйти на абсолютно новый конкурентоспособный рынок. Логистизация бизнес-процессов позволит рационально организовывать любые потоковые процессы, анализировать и оценивать эффективность управления ими, выявлять и использовать резервы и таким образом способствовать повышению эффективности деятельности [1]. Инновационная логистика является научным инструментом, дающим возможность предприятиям разработать программу логистизации с учетом их потенциала и уровня развития [2].

В рамках работы проведено исследование проблемного поля в различных видах логистики: транспортной, складской, закупочной, производственной, информационной. Путем опроса представителей торговых предприятий г. Екатеринбурга было выявлено значительное отставание закупочной и складской логистики.

В результате полученных данных была разработана методика, позволяющая выстраивать логистические бизнес-процессы, оптимально подбирая требуемое количество ресурсов для реализации плана и удовлетворяя потребности общества в тех или иных политических и экономических ситуациях.

1. Голоскоков В. Н. Особенности инновационной логистики и ее применение в сфере железнодорожного транспорта //Креативная экономика. – 2007. – №. 6. – С. 75-82.
2. Капорцева О. Н. Инновационная логистика как фактор повышения эффективности управления бизнес-процессами. – 2017.

ОЦЕНКА ИННОВАЦИОННОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ НА ОСНОВЕ МЕЖДУНАРОДНЫХ СТАНДАРТОВ

Доманова М.Е.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
E-mail: domanova5@yandex.ru

ASSESSMENT OF THE ORGANIZATION'S INNOVATION ACTIVITY BASED ON INTERNATIONAL STANDARDS

Domanova M.E.[1]
[1)] Ural Federal University named after the First President of Russia B. N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia

The existing methods analyze the innovative potential of the enterprise by a narrow number of indicators. Our methodology presents groups of indicators with broad parameters. The main innovative component is the environmental factor. The proposed methodology has been tested at the Mechel PJSC.

Современное развитие экономических отношений в России должно базироваться на повышение конкурентоспособности организаций, что обеспечивается реализацией инновационных, индустриальных и инфраструктурных проектов. Низкая инновационная активность предприятия может рассматриваться как фактор сдерживания данного процесса. С целью формирования и реализации эффективного портфеля проектов необходимо оценить мобилизационный потенциал организации.

Существует три основных подхода к определению уровня инновационной активности предприятия. Анализ специальной литературы позволил сделать вывод, что в промышленности целесообразно использовать ресурсный подход, позволяющий оценить компоненты (финансовые, материально-технические, трудовые, информационные), имеющие разное функциональное назначение. Ресурсные возможности данных компонентов выступают основой для формирования инновационной активности предприятия.

На основании проведенного исследования была разработана комплексная методика оценки инновационной активности, включающая в себя основные различные факторы (экономические показатели, финансовые, трудовые). Опрос специалистов показал необходимость использования экологического фактора при оценке промышленных предприятий. Разработаны рекомендации внедрения методики с учетом специфики финансово-хозяйственной деятельности металлургических предприятий.

Внедрение методики на предприятии позволит выявить особенности инновационной деятельности организации, определить направления повышения

конкурентоспособности, повысить эффективность системы управления, разработать комплекс проектных мероприятий.

Представленная методика прошла экспертную оценку директора управления производственного планирования и технического развития ПАО «Мечел» и директора департамента технологического развития «УК Мечел-Сталь».

1. https://www.dissercat.com/content/metody-otsenki-innovatsionnoi-aktivnosti-promyshlennykh-predpriyatii?ysclid=ldr1md6mrq840649002/read/pdf/read/pdf/read/read/read/read/read
2. https://cyberleninka.ru/article/n/metodicheskie-podhody-i-protsess-otsenki-innovatsionnogo-potentsiala-metallurgicheskih-kompaniy/viewer

ИНСТРУМЕНТАРИЙ ФОРМИРОВАНИЯ ИННОВАЦИОННОЙ СРЕДЫ ПРЕДПРИЯТИЙ ПО ТЕХНИЧЕСКОМУ ОБСЛУЖИВАНИЮ МЕДИЦИНСКОЙ ТЕХНИКИ

Дуйкова С.О.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: sonya.duikova@mail.ru

TOOLS FOR FORMING INNOVATIVE ENVIRONMENT OF ENTERPRISES FOR MAINTENANCE OF MEDICAL EQUIPMENT

Duikova S.O.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The article describes the tools for the formation of an innovative environment for enterprises for the maintenance of medical equipment. 75% of the medical equipment market in Russia is occupied by imported equipment, but now there are problems in the supply of parts for its repair.

Для обеспечения здоровья нации необходимо не только наличие высококвалифицированного персонала, а также современное медицинское оборудование. 75% рынка медтехники в России занимает импортное медицинское оборудование и лишь 25% приходится на продукцию отечественного производства [1].

В связи с активным введением санкций со стороны западных государств, на рынке медицинского оборудования возникли проблемы с логистикой поставок изделий медицинской техники, комплектующих, расходных материалов [2]. Данные проблемы определяют нарушение регламента технического обслуживания медицинской техники и своевременному выполнению текущих и капитальных ремонтов.

Отсутствие инструментов и комплектующих для ремонта приводит к простою медицинского оборудования для диагностики и лечения пациентов, что затрудняет как работу самих врачей, так и лишает возможности полноценно оказывать медицинскую помощь населению.

Целью данного исследования является формирование внутренней и внешней инновационной среды на основе современных методов, что способствует выполнения регламентов обслуживания медицинской техники и развитию организаций в этой сфере деятельности.

В рамках работы проведен анализ рынка медицинского оборудования в России, сформировано понятие «инновационная среда» для сферы медицинской техники, изучены факторы и инструменты формирования инновационной среды

рассматриваемых предприятий [3], проведен опрос среди работников предприятий по техническому обслуживанию медтехники.

Полученные данные позволили разделить предприятия на подгруппы и предложить для каждой группы инструменты формирования инновационной среды, а также методику их внедрения.

1. Рынок медоборудования и изделий в РФ: российские аппараты ИВЛ [Электронный ресурс] // АО АК "Деловой профиль". URL: https://delprof.ru/press-center/open-analytics/rynok-medoborudovaniya-i-izdeliy-v-rf-rossiyskie-apparaty-ivl/ (дата обращения: 10.11.2022).
2. «Рынок не уничтожен, но изменения произошли драматические» // "РБК+". URL: https://plus.rbc.ru/partners/634da3e97a8aa9607cb46d31 (дата обращения: 12.12.2022)
3. Автор Колосов И.Е. Разработка инструментария формирования инновационной среды предприятия по производству медицинских изделий [Текст]: автореф. дис. на соиск. учен. степ. канд. эконом. наук (08.00.05) / Колосов Илья Евгеньевич; ФГБОУ ВПО "Нижегородский государственный архитектурно-строительный университет". - Нижний Новгород, 2012. - 23 с.

ИННОВАЦИИ В ЭКОНОМИКЕ: КЛЮЧЕВЫЕ ДРАЙВЕРЫ И ВЫЗОВЫ

Гофман Д.Д.[1], Павлов Е.С.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: gofman.danil.02@mail.ru

INNOVATION IN THE ECONOMY: KEY DRIVERS AND CHALLENGES

Gofman D.D.[1], Pavlov E.S.[1]
[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia B.N.Yeltsin, Yekaterinburg, Russia

Innovation is at the heart of the modern economy. It is considered to be the main driver of economic growth, increased productivity and improved living standards.

Инновации включают создание и применение новых идей, продуктов, процессов и бизнес-моделей, которые стимулируют экономический рост и конкурентоспособность. В последние годы политики и бизнес-лидеры признали важность инноваций как важнейшего инструмента для решения проблем глобализации, изменения климата и демографических изменений.

Ключевые движущие силы инноваций:

1. Технологические изменения:

Технологические изменения являются основной движущей силой инноваций в экономике. Новые технологии, такие как искусственный интеллект (ИИ), блокчейн и Интернет вещей (IoT), меняют то, как мы живем и работаем. Эти технологии могут разрушить существующие бизнес-модели и создать новые возможности для компаний, чтобы они отличались от своих конкурентов.

2. Глобализация:

Глобализация является еще одним ключевым фактором инноваций в экономике. Поскольку компании стремятся выйти на новые рынки и расширить свою деятельность по всему миру, они должны адаптироваться к местным рыночным условиям, культурным нормам и правилам. Это требует значительного уровня инноваций в дизайне продукта, маркетинге и распределении. Более того, растущий поток людей, товаров и идей через границы создал глобальную сеть знаний и опыта, которая является благодатной почвой для инноваций.

3. Демографические изменения:

Демографические изменения, такие как старение населения и изменение потребительских предпочтений, также стимулируют инновации в экономике. Например, старение населения создает новые потребности в продуктах и услугах здравоохранения, а изменение потребительских предпочтений приводит к разработке новых продуктов для образа жизни, таких как фитнес-трекеры и устройства для умного дома.

Проблемы инноваций:

1. Неопределенность:

Инновации связаны с высоким уровнем неопределенности. Инноваторы должны идти на риск и вкладывать ресурсы в разработку новых продуктов или процессов, не зная, будут ли они иметь успех на рынке. Более того, быстрые темпы технологических изменений означают, что продукты и услуги могут быстро устареть.

2. Финансирование:

Инновации требуют значительных инвестиций в исследования и разработки, что может быть сложной задачей для бизнеса, особенно для малых и средних предприятий (МСП). Более того, риск неудачи может отпугнуть инвесторов от финансирования инновационных проектов.[1]

3. Регулирование:

Регулирование может создавать серьезные проблемы для инноваций. В некоторых случаях правила необходимы для обеспечения безопасности и защиты потребителей. Однако регулирование может также создавать барьеры для выхода на рынок, подавлять конкуренцию и замедлять темпы инноваций.[1]

Заключение:

Инновации являются важнейшей движущей силой экономического роста, производительности и конкурентоспособности. Технологические изменения, глобализация и демографические изменения создают новые возможности для компаний, но также представляют серьезные вызовы.

1. Сайфуллина С.Ф. ПРОБЛЕМЫ ИННОВАЦИОННОГО РАЗВИТИЯ РОССИЙСКИХ ПРЕДПРИЯТИЙ // Успехи современного естествознания. – 2010. – № 3. – С. 171-173; URL: https://natural-sciences.ru/ru/article/view?id=7969

МЕТОДИКА ОЦЕНКИ ПРОЕКТНОЙ ЗРЕЛОСТИ КАК НЕПРЕРЫВНЫЙ ПРОЦЕСС СОВЕРШЕНСТВОВАНИЯ ОРГАНИЗАЦИИ

Хохлов Д.С.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: dmitriy.khokhlov98@gmail.com

METHODOLOGY FOR ASSESSING PROJECT MATURITY AS A CONTINUOUS PROCESS OF ORGANIZATION IMPROVEMENT

Khokhlov D.S.[1]
[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin

The study represents an improvement of the MINCE maturity assessment model. In particular, key metrics for evaluating project maturity for each of the areas of the organization's activities have been developed. An evaluation algorithm has been presented that corresponds to the concept of continuous.

Инновации являются неотъемлемой частью любой современной экономики, особую значимость они приобретают в настоящий момент, учитывая сложные внешнеэкономические обстоятельства. Инновационное развитие России закреплено в указе Президента Российской федерации «О национальных целях и стратегических задачах развития Российской Федерации на период до 2024 года». Одними из целей данного указа являются, ускорение технологического развития РФ, увеличение количества организаций, осуществляющих технологические инновации, до 50% от из общего числа [1]. Данные доводы подчеркивают актуальность повышения эффективности инновационных проектов.

Одним из факторов, влияющих на эффективность инновационных проектов является проектная зрелость организации. Стоит отметить, что данная характеристика применима только к сложившимся предприятиям, а не стартапам, которые в большинстве случаев не имеют характеристик, присущим компаниям, таких как организационная структура, стратегия развития, устоявшаяся бизнес-модель. Уровень проектной зрелости является общепринятой характеристикой, признанной экспертами в области проектного менеджмента, а также проектными институтами. Проектная зрелость компаний оценивается при помощи моделей оценки, институт управления проектами опубликовал список из 27 общепринятых моделей [2].

Для целенаправленного совершенствования своей деятельности компании, реализующие проекты, используют модели оценки зрелости, чтобы оценить, на каком этапе развития находится организация. Целью таких моделей является поиск пути улучшения систем и процессов управления проектами. Алгоритм

усовершенствования проектной деятельности представляет собой системный подход, который не ограничивается системами и процессами управления и затрагивает такие аспекты деятельности предприятия, как работа с заказчиком и клиентами, обучение сотрудников, управление знаниями, поддерживающий сервис. Одним из вариантов комплексного улучшения системы управления проектами и увеличения уровня проектной зрелости является поэтапное внедрение организационных изменений.

В исследовании разработаны ключевые метрики оценки проектной зрелости по каждому из направления деятельности организации, за базу была взята инкрементная модель зрелости в контролируемой среде (MINCE). Кроме того, представлен алгоритм проведения оценки, который соответствует концепции непрерывного улучшения.

1. Динамика и перспективы развития ИТ-отрасли – ресурс доступа: https://issek.hse.ru/news/371816718.html
2. Указ Президента Российской Федерации «О национальных целях и стратегических задачах развития Российской Федерации на период до 2024 года»
3. Pennypacker, J. S. & Grant, K. P. (2002). Project management maturity: an industry-wide assessment. Paper presented at PMI® Research Conference 2002: Frontiers of Project Management Research and Applications, Seattle, Washington. Newtown Square, PA: Project Management Institute.

АНАЛИЗ СТУДЕНЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ В СФЕРЕ ПАТРИОТИЧЕСКОГО ВОСПИТАНИЯ МОЛОДЕЖИ СОГЛАСНО КОНЦЕПЦИИ РОСПАТРИОТЦЕНТРА «10 ГРАНЕЙ ПАТРИОТИЗМА»

Колмогорова А.В.[1], Канев М.Н.[1], Белов А.А.[1]
[1)] Федеральное государственное автономное учреждение высшего образования "Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина", г.Екатеринбург, Россия
E-mail: kolmogorova.lisa@mail.ru

STUDENT ACTIVITY ANALYSIS IN THE AREA OF PATRIOTIC EDUCATION OF YOUTH BY ROSPATRIOTCENTER'S CONCEPT "10 FACETS OF PATRIOTISM"

Kolmogorova A.V.[1], Kanev M.N.[1], Belov A.A.[1]
[1)] Federal State Autonomous Educational Institution of Higher Education "Ural Federal University named after the First President of Russia B.N. Yeltsin", Yekaterinburg, Russia

The article discusses the student activity specifics in patriotic associations of educational institutions of higher education in the Sverdlovsk region. Projects are described of the civil and patriotic education of students' personality.

Система образования в России сегодня претерпевает серьезные перемены, связанные с политическим изменением положения страны на международной арене в связи с проведением Вооруженными силами Российской Федерации Специальной военной операции по денацификации и демилитаризации Украины. В первую очередь преобразования касаются внеучебной деятельности обучающихся всех типов образовательных учреждений. На первый план в концепциях развития образовательных учреждений выходит направление «воспитание гражданственности, патриотизма, преемственности традиций, уважения к отечественной истории, историческим, национальным и иным традициям Российской Федерации» .

На разных ступенях образовательного процесса вводятся новые форматы, призванные развивать чувство патриотизма и гражданской идентичности, а также предотвратить случаи фальсификации исторических фактов в сознании представителей детского и молодежного сообщества.

Для синхронизации представления о системе патриотического воспитания и систематизации работы профильных организаций и ведомств в 2021 году Федеральным государственным бюджетным учреждением «Российский центр гражданского и патриотического воспитания детей и молодёжи» (Роспатриотцентр) была разработана концепция «10 граней патриотизма» (далее – концепция), направленная на всестороннее становление и развитие личности

гражданина, по следующим направлениям: культура, семья, наука, история, медиа, добровольчество, защита Отечества, педагогика, спорт и экология.

С целью развития системы патриотического воспитания в высшей школе в соответствии с Федеральным проектом «Патриотическое воспитание граждан Российской Федерации до 2024 года» национального проекта «Образование», в 2020 году была создана Ассоциация студенческих патриотических клубов «Я горжусь» (далее – Ассоциация). Предполагается, что каждый из вузовских клубов-участников в своей деятельности в одинаковой мере будет развивать каждую грань вышеупомянутой концепции, что позволит представителям студенчества реализовать свой потенциал в сфере патриотического воспитания.

На сегодняшний день членами Ассоциации являются 308 университетов России с охватом около 16 000 студентов, что свидетельствует о действенности запущенного механизма работы со студенческой молодежью и об активной деятельности обучающихся в интересующем нас направлении. Однако идеи Концепции не представлены в полной мере в работе студенческих объединений, так как в каждом клубе существует специфика приоритета развития одной или нескольких граней патриотизма. Сложившаяся ситуация требует привлечения дополнительной направляющей деятельности со стороны представителей студенческого самоуправления, для создания условий всестороннего развития личности студентов.

1. Федеральный закон от 30 декабря 2020г. №489-ФЗ «О молодежной политике в Российской Федерации»
2. Основы патриотического воспитания граждан Российской Федерации. Методические рекомендации – ФГБУ «Роспатриотцентр» 10.10.2022г.

THE POLYCODE TEXTS DIDACTIC CAPABILITIES AND INNOVATIVE TECHNOLOGIES FOR THEIR IMPLEMENTATION

Krochin A.L.[1], Spitsin S.E.[1]
[1)] Ural federal University, Ekaterinburg, Russia
E-mail: alkrochin@yandex.ru

The polycode texts has appeared in the linguistical discourse as a combination of recent semantical systems. We comparative analyzed of the approaches of linguists, lecturers and physiologists to the mechanism of this influence on listeners, technological methods of its implemantation are offered.

Nowadays scientific visualization is the effective tool, used in science and in education. An interactive and dynamical teaching material in PDF allow increasing the learning process effectiveness. The lecturer uses several semantic systems: native spoken language, mathematical language (variables, functions, transformations, logical symbols), visualizations. The latter have long been regarded as well-defined sentences composed of graphic primitives, symbols and iconic elements of various nature. This language can be divided into specialized dialects: an engineer drawing, different statistical diagrams (histograms, pie charts, box with whiskers etc). The mathematical visualizations are well defined and understandable to any scientist and engineer.

As many researchers note in their works, all these semantic components are inextricably synergistically linked. Formulas and graphs are directly perceived by specialists as well as musicians read the notes of the most complex scores. In the works of linguists, it is noted that in scientific and technical texts, the pictorial series has a cognitive purpose. This is such an element of the text, without which the text loses its cognitive essence, i.e. textuality.

Millennia of human development, having five channels of receiving signals from the outside, developed his brain so that he processed the visual channel in the best way. Various estimates give for this information channel a capacity orders of magnitude higher than the rest. One can offer an actual metaphor – a computer graphics processor – a video card.

Well known that by means of a specialized programming language CUDO, we have a possibility to carry out on the video cards the most complex calculations previously available only to supercomputers. Adequate visualization, diagram, drawings and animations is the encoding of information for your brain in the appropriate description, allowing it to effectively solve complex tasks.

There is no generally accepted understanding of how the human brain functions yet. It is known that the main and characteristic only for a person is the collective mode of the brain. In this mode, a network of neurons operates, connecting different points of the brain. Unlike the local mode, external information channels practically do not work. Any creative person will agree that the solution to a complex problem often

occurs secretly, in the depths of consciousness. And ends with a moment of "insight", when the result is realized instantly.

Henri Poincare worked with a difficult problem for several weeks. And at that moment, when he was getting on the bus, the answer suddenly "floated" from the part of the brain that continued to work all this time.

In the works of linguists, a model is proposed, according to which the polymodal representation of the text is processed by the brain in parallel and jointly by various mech.

The authors use several tools. First of all, this is a LaTeX system with graphical addons Tikz.

1. T.I. Popova, D.V. Kolesova POLYCODE VS VERBAL TEXT IN ACADEMIC LECTURE DISCOURSE // Society. Communication. Education.2020. T. 11, № 3. C. 78–87
2. E.A. Dolzhich POLYCODE AS DISPLAY OF INTERDISCOURSIVITY IN SPANISH SCIENTIFIC DISCOURSE. \\ URL: https://journals.rudn.ru/polylinguality/article/view/1776/ 1249/ru_RU (access date: 03.04.2022).
3. Krochin A. L., Spitsin S. E., Krokhin L. A.} VISUAL METAPHORS\\ OF MATHEMATICAL OBJECTS AND AUGMENTED REALITY\\ TECHNOLOGY IN HIGH EDUCATION // ФИЗИКА. ТЕХНОЛОГИИ. ИННОВАЦИИ. IX Международная молодежная научная конференция ФТИ-2022 URL :\verb#http://fizteh.urfu.ru/fileadmin/user_uload/site_19855/Conference# \verb#/2022/Tesisy_FTF-2022_WolIBN_1.0.pdf, p. 926# (access date: 03.11.2022).

ФОРМИРОВАНИЕ УСЛОВИЙ ЦИФРОВОЙ ТРАНСФОРМАЦИИ СЕЛЬСКОГО ХОЗЯЙСТВА

Мешкова А.В.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: meshkovaarina333@gmail.com

FORMING CONDITIONS FOR DIGITAL TRANSFORMATION OF AGRICULTURE

Meshkova A.V.[1]
[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia B. N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia

This article deals with commercialization and usage of digital technology in the agicultural sector. The agricultural sector has been analyzed in terms of innovative development. The methodology of assessment of digital maturity of agricultural companies is offered.

Низкий уровень экономического, научно-технического и информационного развития сельского хозяйства определяют необходимость формирования инновационной среды с возможностью модернизации и дальнейшего развития. Цифровая трансформация позволяет повысить инновационную активность организаций в данной сфере деятельности.

Государственные решения являются основным мотивирующим фактором внедрения цифровых технологий на предприятиях сельского хозяйства в РФ [1]. Цифровая трансформация — это национальная цель развития Российской Федерации до 2030 года, в которую входит достижение «цифровой зрелости» ключевых отраслей экономики и социальной сферы [2].

В ходе исследования выявлены причины, определившие отставание сельского хозяйства по уровню информатизации и использованию информационных технологий, проведена систематизация факторов формирующие цифровую экосистему сельскохозяйственной организации, определены условия цифровой трансформации.

Одним из этапов внедрения цифровых технологий на предприятие является оценка цифровой зрелости организации, на основе которой принимаются управленческие решения по разработке проектных мероприятий. Цифровая зрелость определяется наличием конкурентных преимуществ в использовании цифровых инструментов в деятельности предприятий и информационных систем или процессов, которые могут быть интегрированы в будущую цифровую систему [3].

Для наиболее достоверной оценки цифровой зрелости организаций сельского хозяйства необходимо учитывать особенности отрасли. Проанализировав инновационное состояние отрасли и существующие методики оценки цифровой зрелости, была составлена методика для оценки цифровой зрелости предприятий сельского хозяйства.

Анализ проведенных исследований доказывает перспективность внедрения цифровых технологий и повышение инновационной активности, конкурентоспособности организаций. Формирование условий цифровой трансформации повысит эффективность процесса, где оценка цифровой зрелости является элементом системы поддержки в области принятия управленческих решений.

1. Пантелеева, Т. А. Проблемы развития цифровых бизнес-моделей предприятий АПК: зарубежный и отечественный опыт / Т. А. Пантелеева // Продовольственная политика и безопасность. – 2021. – Т. 8, № 1. – С. 63-84. – DOI 10.18334/ppib.8.2.111561. – EDN VMSXDQ.
2. Указ Президента Российской Федерации от 21.07.2020 г. № 474 «О национальных целях развития Российской Федерации на период до 2030 года» // Собрание законодательства РФ [Электронный ресурс]. URL: http://www.consultant.ru/document/cons_doc_LAW_380244/95306fd63c6d78809f4ae93a22b776b264fcb0d7/ (Дата обращения 20.02.2023)
3. Бекбергенева, Д. Е. Этапы процесса цифровизации предприятия / Д. Е. Бекбергенева // Актуальные направления современной науки, образования и технологий : Материалы Всероссийской научно-практической конференции, Чебоксары, 23 апреля 2020 года. – Чебоксары: Негосударственное образовательное частное учреждение дополнительного профессионального образования "Экспертно-методический центр", 2020. – С. 76-81. – EDN UYTNRD.

МЕТОДИКА ПРОЕКЦИОННОГО КОНСТРУИРОВАНИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЭЛЕКТРОННОЙ 3D-СРЕДЫ «LIGROGAME» В ДОШКОЛЬНОМ ОБРАЗОВАНИИ

Молоднякова А.В.[1]
[1)] доцент кафедры ППО (психолого-педагогического образования) НТГСПИ (ф) РГППУ (нижнетагильского филиала Российского государственного профессионально-педагогического университета),
E-mail: molodnalena@yandex.ru

THE METHOD OF PROJECTION DESIGN USING THE ELECTRONIC 3D ENVIRONMENT "LIGROGAME" IN PRESCHOOL EDUCATION

Molodnyakova A. V.[1]
[1)] docent of the Department of PPO (Psychological and Pedagogical education) of NTGSPA (f) RGPPU (Nizhny Tagil branch of the Russian State Vocational Pedagogical University)

The article discusses the educational possibilities of the domestic solution of the "electronic environment for 3D modeling LigroGame" and the projection designer "Turtle" for the development of constructive modeling activities based on projections of the type of object

Многими исследователями (В. И. Бочаров, М. А. Шустова) отмечается высокое значение начального технического моделирования и конструирования для становления инженерного образования на уровне дошкольного и дополнительного образования детей. Новизна предлагаемой методики конструирования (автор Молоднякова А.В.) для данного уровня образования заключается в интеграции конструирования на основе проекций вида объекта с использованием 3D моделирования в электронной среде «LigroGame».

Специалисты отмечают, что «для конструктивно-технической деятельности базовой познавательной деятельностью является способность к пространственному воображению» [1], которая формируется в процессе использования чертежей и схем. Особенность построения объекта в проекционном конструировании заключается в способности воспитанника ориентироваться по пространственным позициям (видам) объекта, умении определять у объекта пространственные позиции, читать и фиксировать их в чертеже.

Для действий с объемными геометрическими телами в виртуальной 3D-среде «LigroGame» был разработан индикатор пространственных позиций визуально обозначенный «Черепашкой», который ориентирует детей в пяти пространственных позициях формы на рабочем поле режима «создать проект»: «вид спереди», «вид справа», «вид сзади», «вид слева», «вид сверху». В проекционном конструировании (проекционный конструктор «Черепашка», патент № 132058) используется наглядный дидактический материал в виде

чертежа с проекциями вида «Черепашки» («вид спереди», «вид сбоку», «вид сверху»), оригинальная конструкция которого позволяет сложить чертёж из плоского положения в объемный вид, где проекции вида объекта можно наглядно зафиксировать в виде «теней» объекта. Для обучения детей проекционному конструированию педагог проводит демонстрацию деятельности на основе 2-3-х цветных кубиков, определяя проекции вида постройки по изображениям «Черепашки» на чертеже и наглядно закрашивая проекции вида сторон постройки на разделах чертежа, далее предлагает детям, ориентируясь по данным проекциям, собрать постройку. Следующим этапом является создание данной постройки в 3D-среде «LigroGame», ориентируясь по проекциям вида «Черепашки» в объемном чертеже постройки. Эти позиции определяются путем поворота рабочего поля с формой в режиме «LigroGame» «создать проект», где «Черепашка» демонстрирует детям определенную пространственную позицию объемного геометрического тела. Таким образом у детей формируются представления о пространственных позициях объекта в виртуальной среде, что позволяет перейти к моделированию трехмерных форм.

Рис. 1. «Проекционное конструирование по теме «Кит» и 3D моделирования в программе «LigroGame, МБДОУ д/ с № 17, г. Кирово-Чепецк

«Проекционное конструирование по теме «Кит».

Таким образом в процессе данной деятельности у детей формируются не только традиционные навыки конструктивно-модельной деятельности, но и навыки «чтения» чертежа, ориентация по проекциям вида объекта для конструктивно-модельной деятельности и навыки компьютерного 3D моделирования в программе «LigroGame», что является радикальным новшеством для дошкольного образования.

1. Ананьев Б.Г., Рыбалко Е.Ф.. Особенности восприятия пространства у детей. - Москва : Просвещение, 1964, С.149
2. Режим доступа: https://studbooks.net/1757618/pedagogika/struktura_prostranstvennogo_myshleniya
3. Молоднякова А.В. Технология игрового 3D моделирования в LigroGame как инновационный метод для развития естественно–математических представлений детей дошкольного возраста на основе цифровых технологий/ Психология личности: культурно-исторический подход // Материалы XX Международных чтений памяти Л.С. Выготского. Москва, 18 20 ноября 2019 г. / Под ред. Г.Г. Кравцова: В 2 т. Т.2. М.: Левъ, 2019, С. 158
4. Ссылка на Реестр https://industryart.ru/reestr-rossijskix-proizvoditelej-sredstv-obucheniya-i-vospitaniya/
5. Ссылка на проекционное конструирование по теме "Кит" https://youtu.be/BaC8DTDJczw

ПАТЕНТНАЯ И ИННОВАЦИОННАЯ АКТИВНОСТЬ В РОССИИ: ЦИФРЫ И ПРОБЛЕМЫ

Павлов Е.С.[1], Гофман Д.Д.[1]
[1)] ФГАОУ ВО «УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», город Екатеринбург, Россия.
E-mail: e.s.pavlov@urfu.ru

PATENT AND INNOVATION ACTIVITY IN RUSSIA: NUMBERS AND PROBLEMS

Pavlov E.S.[1], Gofman D.D.[1]
[1)] "UrFU named after the first President of Russia B.N. Yeltsin", Yekaterinburg, Russia.

The article is devoted to the problems of patent and innovation activity in Russia. There is an observed discrepancy between the rather high patent activity in Russia, the stability of Russia's positions in the world innovation ratings and the low level of real innovation activity.

Индикатором инновационной активности страны, является, в первую очередь, число регистрируемых патентов. Как отмечает Рахматуллин Р.Р., «масштаб патентования является важным критерием инновационного развития страны» [1]. При этом он отмечает прямую корреляцию факта получения патента с конкурентоспособностью товаров российских производителей, а следовательно, и с конкурентоспособностью национальной экономики в целом.

Если говорить о патентной активности России, то на протяжении последних десяти лет страна прочно входит в десятку мировых лидеров по числу поданных заявок на получение патентов. В частности, в 2020 году в России было подано 35 511 заявок на получение патентов.[2]

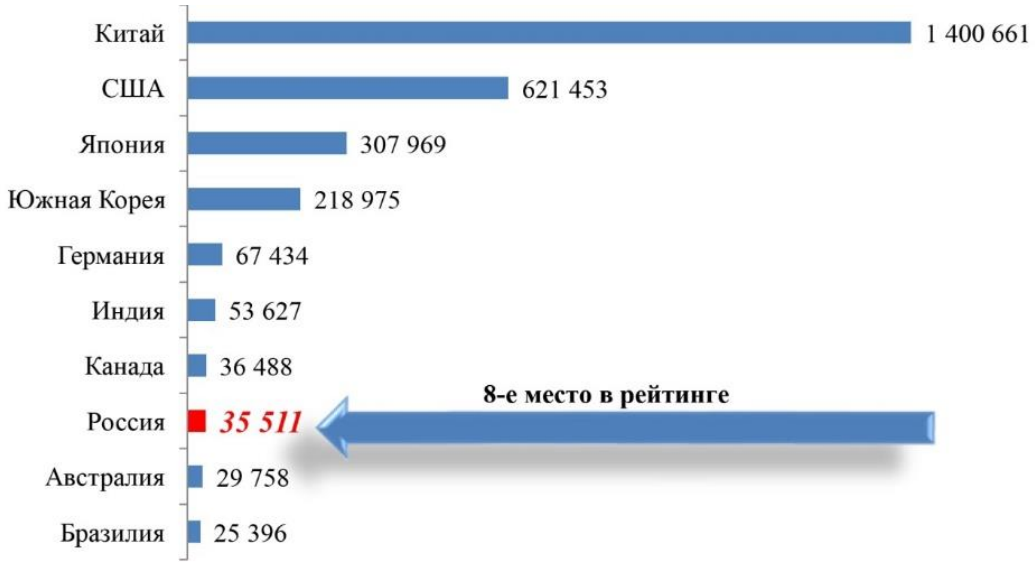


Рис. 1. Россия в TOP-10 рейтинга стран по количеству патентов в 2020 году

Однако, если говорить о масштабах патентной деятельности, Российская Федерация пока еще заметно отстает от мировых лидеров, таких как США, Япония и Южная Корея, не говоря уже о КНР, где число поданных заявок больше, чем число заявок во всех остальных странах.

Несмотря на достаточно большое число поданных заявок на патенты и факт вхождения РФ в десятку мировых лидеров по данной позиции, реальную инновационную активность организаций пока еще можно оценивать как весьма умеренную. На основании данных исследования НИИ ВШЭ, по уровню инновационного развития Россия в 2022 году занимала 47-е место в Глобальном инновационном индексе (Global Innovation Index) среди 132 ранжированных стран.[3]

Статистическая оценка инновационной активности российских предприятий носит формальный характер. Очевидно, что имеет место явный разрыв между патентной активностью в России, включая активность нерезидентов, и реальными итогами внедрения результатов интеллектуальной деятельности в бизнес-процессы. В случае сохранения status-quo, либо, что еще хуже, увеличения существующего разрыва, рост конкурентоспособности российской экономики представляется весьма проблематичным.

1. Рахматуллин Р.Р. Анализ российской патентной активности в сравнении с другими государствами и связанные с ними правовые проблемы по получению патентов в России / Р.Р. Рахматуллин // Международный журнал гуманитарных и естественных наук № 5-3 (68), 2022 – Новосибирск, 2022 – с. 180 – 185.
2. Рейтинг стран по количеству патентов [Электронный ресурс] / Информационный портал NoNews – Режим доступа: https://nonews.co/directory/lists/countries/number-patents
3. Власова В.В. Россия в Глобальном инновационном индексе – 2022 [Электронный ресурс] / В.В. Власова, А.Д. Сапрыкина // НИУ ВШЭ – Режим доступа: https://issek.hse.ru/news/777572032.html

АНАЛИЗ НОРМАТИВНО-ПРАВОВОЙ БАЗЫ И РАЗРАБОТКА РЕКОМЕНДАЦИЙ ПО УЛУЧШЕНИЮ ТЕХНОЛОГИЙ БЛАГОУСТРОЙСТВА И СОДЕРЖАНИЯ ПРИДОМОВЫХ ТЕРРИТОРИЙ

Початкова Е.И.[1], Селезнев А.А.[1, 2]
[1)] Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
[2)] Институт промышленной экологии УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: pochatkova.ekaterina@gmail.com

ANALYSE THE LEGAL AND REGULATORY FRAMEWORK AND DEVELOP RECOMMENDATIONS TO UPGRADE TECHNOLOGIES FOR THE IMPROVEMENT AND MAINTENANCE OF ADJOINING AREAS

Pochatkova E.I.[1], Seleznev A.A.[1, 2]
[1)] Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia
[2)] Institute of Industrial Ecology, Ural Branch, Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russia

An analysis of compliance with legislation by housing authorities in Russia was carried out. The research toolkit is developed on the basis of federal legislation. The most widespread categories of services in the regulations of housing authorities have been identified.

В городах России отмечается значительное накопление поверхностных отложений [1], что негативно влияет на здоровье населения и увеличивает государственные расходы в связи с необходимостью устранения последствий. Эффективная организация работ по содержанию и благоустройству городских территорий может помочь в решении данной проблемы. Вероятно, либо управляющие организации не выполняют требования законодательства, либо требований законодательства недостаточно для обеспечения качественного содержания и благоустройства придомовых территорий.

Для ответа на поставленный вопрос был проведен анализ соответствия регламентов деятельности управляющих организаций административных центров федеральных округов России федеральному законодательству в этой сфере. Метод исследования – контент-анализ, инструментарий формировался на основании федерального законодательства, в выборочную совокупность вошло 150 управляющих организаций.

В результате дана характеристика информационной открытости управляющих организаций: более половины исследуемых организаций не предоставляют в свободном доступе регламенты своей деятельности. Меры административной ответственности, а также предлагаемые организациям современные информационные системы не всегда эффективны и достаточны для того, чтобы управляющие организации изменили свою информационную политику. Информационная закрытость может препятствовать осуществлению

общественного контроля и указывает на выраженную управленческую проблематику.

В статье показана частота упоминания отдельных услуг и их категорий в регламентах управляющих организаций. Наиболее представлены услуги и работы, выполнение которых предупреждает возникновение аварийных ситуаций, порчу дорогостоящего имущества, вред здоровью людей. Возможно, это связано с усиленным надзором со стороны контролирующих органов за исполнением именно этих видов работ.

Ранжирование городов показало, что наиболее всего регламенты деятельности соответствуют минимальным требованиям законодательства у региональных центров, а управляющие организации Москвы и Санкт-Петербурга находятся внизу рейтинга. Предположительно причина в существующей диспропорции в раскрытии информации между городами федерального значения и другими центрами федеральных округов. Среди последних меньшее удельное количество управляющих организаций раскрывает информацию о своей деятельности.

В результате исследования были выявлены как пробелы в существующем законодательстве, так и зафиксировано невыполнение федерального законодательства управляющими организациями. На основании выявленных проблем были составлены рекомендации по улучшению технологий благоустройства и содержания придомовых территорий.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант № 18-77-10024-П.

1. Yarmoshenko I.,Malinovsky G., Baglaeva, E., Seleznev A., Atmosphere, 11, p. 19, (2020)

ОЦЕНКА КОМПЕТЕНТНОСТИ КОМАНДЫ УПРАВЛЕНИЯ ИННОВАЦИОННЫМИ ПРОЕКТАМИ В ИТ-СФЕРЕ

Попова А.П.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: annaPF7@yandex.ru

ASSESSMENT OF THE COMPETENCE OF THE MANAGEMENT TEAM OF INNOVATIVE PROJECTS IN THE FIELD OF INFORMATION TECHNOLOGIES

Popova A.P.[1]
[1)] Ural Federal University named after the First President of Russia B. N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia

The report studied approaches in the process of managing a project team in the field of IT, analyzed the roles of IT project team members and the necessary competencies for each role, identified existing methods for assessing the competence of team specialists.

Проектно-ориентированное управление организацией становится актуальным при ускорении трансформации экономических процессов в обществе. Также повышается значимость проектного управления в сфере информационных технологий, где процессы набора и развития команды играют особую роль.

При организации работы над проектом возникают две важные задачи: формирование команды проекта и организация эффективной работы команды. ИТ-сфера является одной из самых быстрорастущих отраслей экономики, обладающей особой спецификой, поэтому к проектам в данной сфере не всегда применимы традиционные методы проектного управления. В зависимости от выбранного подхода, методика оценки и отбора специалистов может изменяться.

Актуальность исследования обусловлена значительным количеством провальных проектов в ИТ-сфере. Одной из причин является неправильный подход к формированию команды управления проектом, что определяет такие проблемы, как конфликты, отсутствие мотивации, подмена общих целей и ценностей.

Анализ специальной литературы позволил сделать вывод, что к проектам в цифровой сфере в процессе управления командой целесообразно использовать проблемно-ориентированный и компетентностный подходы. Первый позволяет учитывать такие элементы, как: бизнес-симуляция, тренинги и формирование доверия. Это позволяет повышать межличностные умения и разрабатывать матрицу ответственности в проектном управлении. При формировании команды более эффективным является компетентностный подход, так как учитывает не

только профессиональные, но и управленческие, личностные характеристики участников проекта. Элементом данного процесса является оценка и развитие компетентности команды в зависимости от вида и сложности реализации проекта в ИТ-сфере.

В инновационной команде ИТ-проекта были выделены следующие роли команды управления проектом: руководитель, администратор, эксперт. Для каждой из ролей были определены необходимые для них компетенции и описаны действующие методы оценки, такие как тестирование профессиональных навыков, кейс-интервью, адаптивное тестирование, метод PARLA и STAR. В зависимости от специфики проекта роли и компетенции могут меняться, но большая часть из них должна оставаться неизменной в рамках стратегического управления.

На основании проведенного исследования были проанализированы существующие подходы к формированию команд, выявлены ключевые роли членов команды управления ИТ-проекта, даны характеристики современным методикам оценки компетентности, а также описаны основополагающие компетенции по трем категориям компетентностного подхода. Данное исследование позволит в будущем значительно улучшить процесс формирования команды управления инновационного проекта, повысить эффективность проектной команды, и, как следствие, понизить вероятность неудачи проекта.

1. Базаров, Т.Ю. Управление персонала персоналом: учебник для вузов, М.: Академия, (2010 г.);
2. Базаров, Т.Ю. Управленческие команды и их формирование, М.: Аспект пресс, (2002 г.);
3. Туккель И.Л., Сурина А.В., Культин Н.Б., Управление инновационными проектами: учебник для студентов вузов, обучающихся по направлению подготовки "Инноватика", СПб.: БХВ-Петербург, (2011 г.);
4. Зинкевич-Евстигнеева, Т.Д., Фролов Д.Ф., Грабенко Т.М. Теория и практика командообразования. Современная технология создания команд / Под ред. Т. Д. 11 Зинкевич-Евстигнеевой. – СПб.: Речь, (2003 г.);
5. Зинкевич-Евстигнеева, Т.Д. Эффективная команда: шаги к созданию. Руководство для тех, кто хочет создать свою команду, СПб.: Речь, (2003 г.)

ИННОВАЦИОННЫЙ МЕТОД УПРАВЛЕНИЯ КАДРАМИ: НЕСТАНДАРТНАЯ НЕМАТЕРИАЛЬНАЯ МОТИВАЦИЯ

Сабанцева Т. В.[1], Таланкина А. К.[1], Ладейщикова О. М.[1], Мясникова Д. В.[2]
[1)] Студент, Физико-технологического института ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина» г. Екатеринбург, Российская Федерация
[2)] К.с.н. кафедры инноватики и интеллектуальной собственности Физико-технологического института ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина» г. Екатеринбург, Российская Федерация
E-mail: tstana.tstana@gmail.com

INNOVATIVE METHOD OF PERSONNEL MANAGEMENT: NON-STANDARD NON-MATERIAL MOTIVATION

Sabantseva T. V.[1], Talankina A. K.[1], Ladeyschikova O. M.[1], Myasnikova D. V.[2]
[1)] Student, Institute of Physics and Technology, Ural Federal University named after the First President of Russia B.N.Yeltsin, Yekaterinburg, Russian Federation
[2)] Ph.D. Department of Innovation and Intellectual Property Institute of Physics and Technology Federal State Autonomous Educational Institution of Higher Education "Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin" Yekaterinburg, Russian Federation

The article studied the influence of non-material motivation to increase the innovativeness of personnel management.

When writing the article, it was concluded that the basic principles of intangible motivation should be included in the company's innovative HR management strategy.

Нематериальная мотивация является важным фактором успеха в бизнесе. Так как дает возможность компании сократить издержки на мотивацию сотрудников [1]. На основе данных из опроса студентов заочников имеющих реальный опыт работы на предприятиях был произведен контент анализ и составлен каталог с ранжированием методов нематериальной мотивации.

Целью данной работы была систематизация и классификация инструментов нематериальной мотивации и инновационные управленческие решения в области управления кадрами. Полученный нами список методов может использоваться для эффективного инновационного управления персоналом. Материальная мотивация может сработать только на короткий срок, тогда как нематериальная мотивация может оказывать положительное влияние на сотрудников в течение длительного времени [3].

В статье изучалось влияние нематериальной мотивации на психологическое и физическое состояние сотрудников. Посредством удовлетворения психологических потребностей сотрудников в признании предполагается добиться более высокой продуктивности и работоспособности [2].

Также, поскольку сотрудник проводит на работе большую часть времени, посредством некоторых видов нематериальной мотивации предполагается удовлетворять его потребности в активной социальной жизни. Такие как неформальные встречи и отдых на природе.

Основные принципы нематериальной мотивации должны быть включены в стратегию инновационного управления кадрами компании.

1. Тимакова, К. С. Особенности использования методов нематериальной мотивации персонала в организации / К. С. Тимакова, Н. А. Юкина // Актуальные научные исследования в современном мире. – 2021. – № 1-4(69). – С. 268-270.
2. Аргашокова, О. И. Проблемы управления мотивацией персонала / О. И. Аргашокова // Социально-гуманитарные технологии. – 2020. – № 4(16). – С. 23-31.
3. Басюк, А. С. Мотивация, как механизм эффективного управления персоналом / А. С. Басюк, А. Д. Якименко, Л. В. Клаус // Социально-экономические и гуманитарные науки: сборник избранных статей по материалам Международной научной конференции, Санкт-Петербург, 27 декабря 2020 года. – Санкт-Петербург: Частное научно-образовательное учреждение дополнительного профессионального образования Гуманитарный национальный исследовательский институт «НАЦРАЗВИТИЕ», 2020. – С. 100-103.

МОДЕЛЬ ДЛЯ ОЦЕНКИ ПОСТУПЛЕНИЯ ПЫЛЕГРЯЗЕВЫХ НАНОСОВ НА УРБАНИЗИРОВАННОЙ ТЕРРИТОРИИ

Шевченко А.В.[1, 2], Селезнев А.А.[1, 2], Ярмошенко И.В.[2], Малиновский Г.П.[2]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина; Почтовый адрес: Россия, 620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19.
[2)] Институт промышленной экологии УрО РАН; Почтовый адрес: 620990, г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 20.
E-mail: av.shev98@gmail.com

MODEL FOR EVALUATION OF SURFACE SEDIMENT IN URBAN ENVIRONMENT

Shevchenko A.V.[1, 2], Seleznev A.A.[1, 2], Yarmoshenko I.V.[2], Malinovsky G.P.[2]
[1)] Ural Federal University named after the first President of Russia B. N. Yeltsin; Postal address: 19 Mira Str., 620002, Ekaterinburg, Russia.
[2)] Institute of Industrial Ecology, Ural Branch of Russian Academy of Sciences; Postal address: S. Kovalevskoy, Str., 20, 620990, Ekaterinburg, Russia.

The study of the processes of formation and entry of surface deposited sediments in the urban environment is relevant, taking into account the negative role of this object, including taking into account the requirements of environmental safety.

Целью проведенной работы была разработка модели для оценки поступления твердого седиментационного материала (поверхностных наносов) на урбанизированной территории.

Исследование проведено на примере города Екатеринбурга. Оценку выноса седиментационного материала атмосферными осадками, в том числе при снеготаянии, проводили по модели RUSLE [2], адаптированной для городских условий. Параметры коэффициентов модели RUSLE были получены в соответствие с климатическими и ландшафтными характеристиками г. Екатеринбурга. Для оценки вклада автомобилей в поступление седиментационного материала вследствие износа дорожного покрытия шинами, предложен подход на основе принципа R-фактора модели RUSLE, определяющий воздействие шин через энергию, передающуюся от источника (автомобиля) к поверхности. Для учета интенсивности движения автомобилей был введен коэффициент интенсивности износа. Также, определялся вклад от шипованных шин в зимний период.

Для оценки выноса использована модельная площадка, представляющая собой типичную территорию внутри жилых районов. В рамках модельной площадки выделяются 6 типов функциональных зон, имеющих различные характеристики в зависимости от типа покрытия и режима использования. Расчеты модели проводились для двух вариантов состояния покрытий

функциональных зон: реальный – поверхности частично нарушены, идеальный – поверхности полностью не нарушены. Исходные данные для оценки площадей функциональных зон и доли нарушенных поверхностей были приняты на основе результатов ландшафтных обследований [4].

Полученные оценки поступления седиментационного материала в современном российском городе составили: для реальных условий – 1,7 кг/м^2/год, для идеальных условий – 0,9 кг/м^2/год.

В зимний период (в т.ч. период снеготаяния) основным источником поступления поверхностных наносов являются шипованные шины, на которые приходится 78 % всего поступающего материала в реальном варианте и 92 % в идеальном. В летний период вклад автомобилей в формирование поверхностных отложений также достигает 90%. Нарушенные участки функциональных зон (выбоины, разрушенный газон и т.п.) вносят значительный вклад в образование седиментационного материала, увеличивая его количество почти в два раза. Оценка поступления поверхностных наносов, проведенная по представленной модели, показала сходство с оценками в других подобных исследованиях [1, 3].

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, грант № 18-77-10024-П.

1. Owens P. N., Caley K., Campbell S. et. al. Total and size-fractionated mass of road-deposited sediment in the city of Prince George, British Columbia, Canada: implications for air and water quality in an urban environment. — J. Soils Sediments, vol. 11(6), pp. 1040—1051, (2011)
2. Renard K. G., Foster G. R., Weesies G. A., McCool D. K., Yoder D. C. Predicting Soil Erosion by Water: A Guide to Conservation Planning with the Revised Universal Soil Loss Equation (RUSLE). — U. S. Department of Agriculture, No. 703, P. 404, (1997)
3. Russell K. L., Vietz G. J., Fletcher T. D. Global sediment yields from urban and urbanizing watersheds. — Earth Sci. Rev., vol. 168, pp. 73—80, (2017)
4. Yarmoshenko I., Malinovsky G., Baglaeva E., Seleznev A. A Landscape Study of Sediment Formation and Transport in the Urban Environment. — Atmosphere, vol. 11, No. 1320, (2020)

ИННОВАЦИОННЫЙ МЕТОД ПРЕПОДАВАНИЯ МЕНЕДЖМЕНТА: ЛИТЕРАТУРНЫЕ БИЗНЕС-КЕЙСЫ

Емельянова Е.В.[1], Мясникова Д.В.[2], Штырёва Г.К.[3]
[1)] Старший преподаватель кафедры Международной экономики и менеджмента, Институт экономики и управления, ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина» г. Екатеринбург, Российская Федерация
[2)] К.с.н. кафедры инноватики и интеллектуальной собственности Физико-технологического института ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина» г. Екатеринбург, Российская Федерация
[3)] Студент, Школа экономики и менеджмента, ФГАУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина» г. Екатеринбург, Российская Федерация
E-mail: galia.shtyryowa@yandex.ru

AN INNOVATIVE METHOD OF TEACHING MANAGEMENT: LITERARY BUSINESS CASES

Emelyanova E.V.[1], Myasnikova D. V.[2], Shtyreva G.K.[3]
[1)] Senior Lecturer at the Department of International Economics and Management, Institute of Economics and Management, Federal State Autonomous Educational Institution of Higher Education "Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin" Yekaterinburg, Russian Federation
[2)] Ph.D. Department of Innovation and Intellectual Property Institute of Physics and Technology Federal State Autonomous Educational Institution of Higher Education "Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin" Yekaterinburg, Russian Federation
[3)] Student, School of Economics and Management, FGAU VO Ural Federal University named after the first President of Russia B. N. Yeltsin" Yekaterinburg, Russian Federation

The article discusses the features of the training of modern managers in higher education. The issues of innovation in teaching methods of management disciplines are summarized and special attention is focused on the development and application of creative pedagogical techniques and interactive teac

В статье рассматриваются особенности подготовки современных менеджеров в высшей школе. Обобщаются вопросы инноваций методиках преподавания управленческих дисциплин и акцентируется особое внимание на разработке и применении креативных педагогических приемов и интерактивных методов обучения, а именно на трансформации традиционного метода кейс-стади в формат литературного бизнес-кейса. Практическая значимость статьи заключается в обобщении накопленного опыта использования данного типа методики, дается ее характеристика, способы организации интерактивных

групповых дискуссий, излагается логика исследования бизнес-кейса, указываются рекомендации по применению в образовательном процессе.

Об особенностях преподавания менеджмента:

Академический метод предполагает тиражирование информации путем передачи знаний от преподавателя к студентам.
Активный метод означает получение знаний благодаря самостоятельной работе студентов.

Быстрое развитие средств производства требовало профессионала-исследователя, умеющего применять принципы или процессы, ранее изучавшиеся, к новой ситуации, использовать научные обобщения для решения отдельных проблем или соединять части, элементы в новое целое.

Появление в XX в. интерактивного метода вызвано необходимостью эффективного взаимодействия в команде с целью быстрого получения нового знания и создания атмосферы сотрудничества. Интерактивный метод предполагает совместную работу участников образовательного процесса.

1. Творческие педагогические приемы как ресурс инновационных образовательных технологий / Л. П. Пискунова, Емельянова, Е. В., Пьянков, А. Г., Махароблидзе, А. В. // XI Международная конференция «Российские регионы в фокусе перемен». Екатеринбург, 17-19 ноября 2016 г. : сборник докладов. — Екатеринбург : Издательство УМЦ УПИ, 2016. — Ч. 1. — С. 614-622.
2. Chulanova O.L., Mukhamedova M.M. Case method as an effective tool in the system of training the management personnel of an organization // Internet journal "Mir Nauki" 2015 No. 1 http://mir-nauki.com/PDF/01EMN115.pdf (free access). Title from the screen. Yaz. Russian, English
3. Piskunova E. V. Case studies as a method of humanitarian research // Bulletin of the Cherepovets State University. - 2021. - No. 2 (101). – S. 193–201. https://doi.org/10.23859/1994-0637-2021-2-101-15
4. Smolyaninova O.G. Innovative technologies for teaching students based on the Case Study method: M. - collection "Innovations in Russian Education", VPO, 2000.
5. CASE STUDY: principles of creation and use. - Tver: Publishing house "SKF-office", 2015. - 114 p. Series "Technologies of work with youth"

МЕТОДИКА ОЦЕНКИ КОНКУРЕНТОСПОСОБНОСТИ ИННОВАЦИОННЫХ ПРЕДПРИЯТИЙ

Вырыпаева Е.А.[1]
[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: elizavetaviripaeva@mail.ru

METHODOLOGY FOR ASSESSING THE COMPETITIVENESS OF INNOVATIVE ENTERPRISES

Vyrypaeva E.A.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The study analyzes the problem of the low level of competitiveness of innovative enterprises. The developed methodology will allow enterprises to assess their competitiveness and their place in the market. The results of this assessment can be used to select the company's development strategy.

Успешность предприятий зависит от нескольких факторов, одним из которых является их конкурентоспособность на рынке. В связи с этим возрастает интерес к вопросам управления конкурентоспособностью предприятий.

Конкурентоспособность предприятия – это его способность занимать определенную долю рынка продукции и способность увеличивать или уменьшать данную долю. Конкурентоспособность любого предприятия зависит от количества и значимости его конкурентных преимуществ, благодаря которым оно может достичь превосходства и стать более устойчивым на рынке.

В рамках работы проведено исследование инновационных предприятий, в ходе которого была выявлена проблема недостаточного уровня конкурентоспособности.

В результате полученных данных была разработана методика, позволяющая оценить конкурентоспособность инновационных предприятий и определить положение предприятия на рынке. Результаты данной оценки могут быть использованы для выбора стратегии развития предприятия с учетом текущего положения предприятия и его перспектив развития.

1. Зулькарнаев, И.У. Метод расчета интегральной конкурентоспособности промышленных, торговых и финансовых предприятий / И.У. Зулькарнаев, Л.Р. Ильясова // Маркетинг в России и за рубежом. – 2001. – № 4(24). – С. 17–27.
2. Андреева, А.Е. Многофакторный анализ конкурентоспособности предприятия / А.Е. Андреева // Наука и бизнес: пути развития. – 2017. – № 3

ЭФФЕКТИВНОСТЬ ВНЕДРЕНИЯ ЭКОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЕКТНЫХ МЕРОПРИЯТИЙ В ПРОМЫШЛЕННОСТИ

Ясашных Е.В.[1]
[1)] Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»
E-mail: yasashnykh@icloud.com

EFFICIENCY OF IMPLEMENTATION OF ENVIRONMENTAL DESIGN MEASURES IN INDUSTRY

Yasashnykh E.V.[1]
[1)] Federal State Autonomous Educational Institution of Higher Education "Ural Federal University named after the First President of Russia B.N. Yeltsin."

Innovative activity is one of the promising areas of the economy and types of entrepreneurial activity, since it is associated with high technologies that can give a significant economic effect. The main mechanism for the implementation of the state innovation policy is the formation and improvement.

Производственно-хозяйственная деятельность промышленных предприятий усиливает негативное воздействие на биосферу Земли. Экологические проблемы затрудняют экономическое развитие общества и его нормальное функционирование; приводит к ужесточению мер борьбы за природные ресурсы, увеличению расходов на охрану окружающей среды, ухудшению здоровья населения.

Необходимость государственного регулирования инновационных процессов вызвана их возрастающим значением для экономики страны и общества в целом. Правительство России в последние годы проявляет особую озабоченность состоянием экологической безопасности в стране. На совершенствование нормативно-правовой базы направлены изменения и дополнения законов в области экологии.

Одной из задач национального проекта «Экология» является «создание современной инфраструктуры, обеспечивающей безопасное обращение, и ликвидация наиболее опасных объектов накопленного экологического вреда». Решение данной задачи невозможно без внедрения инновационных проектов в области экологической безопасности, что позволит сочетать высокие темпы экономического роста с минимальным воздействием на окружающую среду.

В процессе исследования был проанализирован понятийный аппарат, проведен ретроспективный анализ термина «инновация», классификации инновационной деятельности предприятий на основе приказов Росстата и руководства Осло. С использованием специальной литературы и официальных документов изучено понятие «экологические инновации» и их виды для

промышленных предприятий. Исследование показало, что внедрение наукоемких инновационных «зеленых» технологий существенно сокращает затраты на обеспечение экологической защиты и минимизирует необходимость применения штрафных санкций.

Для анализа влияния экономики на окружающую среду и оценки эффективности внедрения экологических инноваций применяются разнообразные методики, которые содержат различные экологические показатели и индексы. В ходе исследования были систематизированы факторы оценки эффективности проектных мероприятий, разработана многоуровневая методика, позволяющая определить последствия внедрения инноваций на экологическую безопасность промышленного предприятия.

Таким образом, экологическая составляющая предприятия является актуальной, так как оказывает влияние непосредственно на потребление продукции, изготовленной хозяйствующими субъектами, на здоровье людей, находящихся в непосредственной близости от производственных объектов, а также на конечный экономический результат деятельности самих предприятий. Предложенная методика позволит обосновать целесообразность внедрения проектных мероприятий на предприятии.

1. https://rosstat.gov.ru/

СЕРИЯ СОЦИОЛОГИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ ОТНОШЕНИЯ МОЛОДОГО ПОКОЛЕНИЯ К ИЗМЕНЕНИЯМ ТРУДОВОГО ЛАНДШАФТА В РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Зафиров Е.А.[1], Иванова К.Л.[1], Партов О.Р.[1]
[1)] ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», г. Екатеринбург, Россия
E-mail: e.a.zafirov@urfu.ru

THE SEVERAL SOCIOLOGICAL SURVEYS OF THE ATTITUDE OF THE YOUNGER GENERATION TO CHANGES IN THE LABOR LANDSCAPE IN THE RUSSIAN FEDERATION

Zafirov E.A.[1], Ivanova K.L.[1], Partov O.R.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The article describes sociological surveys among young people conducted with the participation of the UrFU in 2022. The goal was to determine career preferences in the changing conditions of the labor landscape of the Russian Federation. The characteristics and features of the surveys was presented.

Рынок труда в Российской Федерации, в настоящее время претерпевает ряд изменений. Основными из них можно назвать: продолжающееся влияние постпандемийного периода, рост числа вакансий с удаленной занятостью [1], изменение тенденций к трудовой релокации. Все эти изменения сказываются на молодых людях, ищущих свою первую работу. Так же важно отметить, что в настоящее время представители «поколения Z», имеющего свои особенности, оканчивают образовательные организации высшего образования и выходят на рынок труда.

Исследования карьерных предпочтений студентов, в том числе с учетом профессионально-психологических типов проводились и ранее [1; 2]. Однако, масштабность и многоступенчатость нашего исследования являются его преимуществом.

В течение 2022 года Уральский федеральный университет совместно с Автономной некоммерческой организацией «Центр содействия трудоустройству и профориентации молодежи «Время карьеры» провели серию из четырех социологических исследований карьерных предпочтений молодежи Российской Федерации и отношения молодого поколения к изменениям трудового ландшафта, в которых приняли участие более 2500 человек (в том числе неуникальных) – представителей разных регионов Российской Федерации.

В качестве методики исследования были выбраны социологические экспресс-опросы с применением онлайн-сервиса опросов. Особенностью являлось постепенное внедрение тем: первые три опроса состояли не более чем из 10

вопросов, а четвертый опрос был более масштабным и состоял из четырех блоков, лишь отчасти коррелирующих с предыдущими тематиками. Это было необходимо для сохранения взаимосвязи опросов, но избегания дублирования социологических данных.

Характеристики выборки: участники проекта «Время карьеры» в возрасте от 18 до 35 лет. Темы первых трех исследований: «отношение к дистанционной работе»; «отношение к релокации»; «уровень заработной платы». Каждый из первых трех опросов состоял из двух блоков: «краткий портрет аудитории» и «тематический блок». Тематические блоки четвертого опроса, следующие: «краткий портрет аудитории», «ожидания от собеседования при трудоустройстве», «нематериальная мотивация сотрудников» и «профиль «идеального работодателя».

Результаты исследований представлялись в виде пресс-релизов. Перспективы проекта: систематизация исследований в формате барометра (измерения постоянных величин).

Результаты этого исследования важны для понимания и прогнозирования будущего карьерного поведения выпускников образовательных организаций высшего образования, а также для работодателей, ориентированных на предоставление первого места работы недавним выпускникам университетов.

Исследование выполнено при поддержке АНО «Россия – страна возможностей»

1. Сущенко А. Д. Прекаризация труда молодых специалистов: ключевые параметры оценки / А. Д. Сущенко, А. А. Тарасьев. — Текст : электронный // Трансформация реальности: стратегии и практики: 5 й молодежный конвент УрФУ : материалы международной конференции 25–27 марта 2021 года. — Екатеринбург : Изд во Урал. ун-та, С. 669-671, (2021)
2. Духновский С.В. Карьерные предпочтения и профессионально-психологические типы студентов вузов // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Философия. Психология. Педагогика, Т. 20. № 1, С. 69-75, (2020)

СЕКЦИЯ 9

ЮНЫЕ ТАЛАНТЫ

ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ПАРАМЕТРОВ СИНТЕЗА ОКСИДА АЛЮМИНИЯ НА ЕГО УДЕЛЬНУЮ ПОВЕРХНОСТЬ

Могильникова Д.Д.[1], Солодовникова П.А.[2], Вострецова Д.А.[1]
[1)] МАОУ Лицей 128
[2)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина
E-mail: 1mogilnikova.dasha1@gmail.com

THE INFLUENCE OF THE ALUMINUM OXIDE SYNTHESIS PARAMETERS ON ITS SPECIFIC SURFACE

Mogilnikova D.D.[1], Solodovnikova P.A.[2], Vostretsova D.A.[1]
[1)] Municipal Autonomous School № 128
[2)] Ural Federal University named after the First President of Russia B.N. Yeltsin

The authors found the influence of synthesis parameters (deposition pH value, firing temperature, percentage of modifier) on the properties of aluminum oxide. The samples were synthesized by controlled two-jet deposition followed by filtration, drying and firing.

Оксид алюминия (ОА) широко используется в химической промышленности в качестве адсорбента (для обезвоживания газов и жидкостей), катализатора и компонента сложных катализаторов многих химических процессов, носителя при синтезе как металлических, так и оксидных катализаторов [1,2]. Оксид алюминия может быть носителем активной фазы, стабилизируя и предотвращая спекание катализатора, уменьшая плотность распределяя дорогостоящих компонентов (Pt, Pd). Важным технологическим параметром является удельная поверхность оксида алюминия и ее сохранение в реальных эксплуатационных условиях (1000 и 1100 ° С).

В ходе работ были синтезированы методом контролируемого двухструйного осаждения гидроксиды алюминия с их последующим разложением до оксидов. Синтез проводили из нитратного раствора алюминия, регулируемыми параметрами были pH осаждения, процентное содержание модификатора (оксид лантана) и температура обжига. Состаривание образцов проводили при температурах 1000 и 1100 ° С.

Исследуемыми параметрами были удельная поверхность и пористость свежих и состаренных образцов.

Авторы обнаружили, что наибольшие значения удельной поверхности в реальных эксплуатационных условиях сохраняют образцы, синтезированные при pH=6, с процентным содержанием оксида лантана 3%, прошедшие термообработку при 650 и 800 ° С.

1. Пахомов; отв. ред. В.А. Садыков. Рос. акад. наук, Сиб. отд-ние, Ин-т катализа им. Г.К. Борескова. - Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2011

2. Дзисько В.А., Иванова А.С. Осиовные методы получения активного оксида алюминия. // Изв. СО АН СССР, Сер.хим. наук. 1985. М215, вып.5

ПАСПОРТИЗАЦИЯ КОПЕЙ ШАЙТАНСКОГО УЧАСТКА РЕЖЕВСКОГО ПРИРОДНО-МИНЕРАЛОГИЧЕСКОГО ЗАКАЗНИКА

Семенищев Я.В.[1, 2], Борич С.Э.[2]
[1)] МАУ СОШ № 62, г. Екатеринбург, Россия
[2)] МАУ ДО Городской дворец творчества детей и молодежи "Одаренность и технологии", г. Екатеринбург, Россия
E-mail: 89000380860@mail.ru

CERTIFICATION OF SHAITAN MINES AT REZH NATURAL MINERALOGICAL RESERVE

Semenishchev Ya.V.[1, 2], Borich S.E.[2]
[1)] Secondary/High School #62 of Yekaterinburg, Russia
[2)] UIA DO City Palace of Creativity for Children and Youth "Giftedness and Technology", Yekaterinburg, Russia

This article describes the process and results of the study of the Shaitansky mines by young geologists from the "Tropa" geoclub, Yekaterinburg, commissioned by Natural mineralogical reserve «Rezhevskoy». Field researchs were conducted from 28 to 30 October 2022.

Самоцветная полоса Урала – это условное название территории с большим количеством месторождений самоцветов ювелирного качества, расположенной на восточном склоне Среднего Урала. В этих местах самоцветы находили ещё с незапамятных времён, но официальная история Самоцветной полосы начинается в 1668, с находок братьев Тумашевых на реке Нейва. Исследуемый участок располагается в Режевском районе Свердловской области, на территории ПМЗ «Режевской», основанный в 1995 году. Заказник находится в 13 километрах к западу от г. Реж. ПМЗ «Режевской» делится на три участка: Шайтанский на северо-западе, Липовский на северо-востоке и Адуйский на юге. Работы производились на копях Шайтанского участка.

Сведения о состоянии и точном местоположении многих копей давно утеряны. Ранее юными геологами геоклуба «Тропа» для ПМЗ «Режевской» были составлены паспорта 5 копей: Казённые ямы, Епишкина, Ильинская, Козиха и Таганиха, В 2022–2023 г. работа продолжена с участием автора. Наиболее трудной задачей была поиск и привязка копей, определение географических координат.

В 1-й день маршрут был на Медвежское месторождение шайтанского переливта 4,5 км к СВ от базы. Месторождение представляет собой законсервированный мокрым способом карьер. Во 2-й день состоялся маршрут на копи Мора и копи Жёлтые ямы. Копи Мора представляют собой цепь из 33 открытых выработок, лежащих вдоль двух пегматитовых жил, по которым идёт самоцветная минерализация. На 3-й день выполнен маршрут на рубиновые

россыпи близ нежилой дер. Галанина, 4 км к ЮВ от базы. Россыпи представляют собой множество старательских закопушек вдоль реки Медвежка.

Состав работ: привязка GPS-навигатором, замеры ширины и длинны карьера, описание обнажения в ЮВ стенке карьера, включая описание горных пород, замеры трещиноватости и зарисовку. Были взяты образцы гранита и гранитного пегматита из жилы на этом же обнажении, ещё были отобраны образцы кварца, халцедона и шайтанского переливта. Описаны горизонтальные и вертикальные выработки на копи Жёлтые ямы карьера на ней; проведены замеры глубины шурфов и карьера, задокументирована информация об их взаимном расположении. Проведено описание обнажения на стенке карьера, отобраны образцы серпентинитов, пегматита с включениями чёрных турмалинов и гранатов, а также скарнов на контакте жилы с вмещающими породами. На копи Мора были описаны обнажения гранитов на склоне третьей надпойменной террасы с измерениями их линейных размеров, замерами мощности и элементов залегания пегматитовых жил; выполнен отбор образцов. В шлихе найден один кристалл горного хрусталя около 1,3 см в длину, несколько чёрных корундов размером до 0,6 см и несколько очень мелких красных корундов.

В результате работы составлены паспорта двух копей, месторождения и россыпи: копи Мора, копи Жёлтые ямы, Медвежского месторождения и рубиновых россыпей близ Галанино. Данная работа является ещё одним шагом к сохранению информации, связанной с историей Среднего Урала.

ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ПАРАМЕТРОВ СИНТЕЗА ОКСИДА АЛЮМИНИЯ НА ЕГО ВЯЗКОСТЬ В СОСТАВЕ РАБОЧЕЙ СУСПЕНЗИИ

Вострецова Д.А.[1], Солодовникова П.А.[2], Могильникова Д.Д.[1]
[1)] МАОУ Лицей 128
[2)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина
E-mail: dasha.vostretsova06@mail.ru

INFLUENCE OF THE SYNTHESIS PARAMETERS OF THE ALUMINUM OXIDE SYNTHESIS ON ITS VISCOSITY IN THE WORKING SUSPENSION

Vostretsova D.A.[1], Solodovnikova P.A.[2], Mogilnikova D.D.[1]
[1)] Municipal Autonomous School № 128
[2)] Ural Federal University named after the First President of Russia B.N. Yeltsin

The authors have established the effect of precipitation pH, firing temperature and modifier percentage on the viscosity parameter of aluminum oxide in the working suspension.

Оксид алюминия широко применяется в промышленности, в частности - в качестве носителя драгоценных металлов на своей поверхности в составе автомобильного катализатора. Ключевым параметром при нанесении рабочей суспензии, содержащей оксид алюминия, на керамические соты в составе автомобильного катализатора, является вязкость этой суспензии. Авторами было установлено влияние условий синтеза оксида алюминия на данный технологический параметр.

Методом контролируемого двухструйного осаждения из нитратного раствора были синтезированы образцы оксида алюминия с различным содержанием оксида лантана. Рабочую суспензию готовили смешением с оксидами церия и циркония с добавлением уксусной кислоты и расчетным содержанием твердого. Перед измерением вязкости проводили размол частиц до 6-9 мкм в бисерной мельнице. Измерения вязкости проводили на вискозиметре.

Установлено, что с увеличением процентного содержания модификатора (оксид лантана) увеличивается вязкость рабочей суспензии. Такой же эффект наблюдается при увеличении pH осаждения. Увеличение температуры обжига, напротив, приводит к снижению значений данного технологического параметра.

1. Н.А. Пахомов; отв. ред. В.А. Садыков. Рос. акад. наук, Сиб. отд-ние, Ин-т катализа им. Г.К. Борескова. - Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2011
2. Дзисько В.А., Иванова А.С. Осиовные методы получения активного оксида алюминия. // Изв. СО АН СССР, Сер.хим. наук. 1985. М215, вып.5

Научное издание

ФИЗИКА. ТЕХНОЛОГИИ. ИННОВАЦИИ
ФТИ-2023

**X Международная молодежная научная конференция,
посвященная 120-летию со дня рождения академиков
И.В. Курчатова и А.П. Александрова**

Екатеринбург, 15-19 мая 2023 г.

Тезисы докладов

Ответственность за правильность, точность и корректность цитирования, ссылок и перевода, достоверность информации и оригинальность представленных материалов несут их авторы.

Печатается в авторской редакции

Компьютерная верстка *А. В. Ищенко и Е. Дерендяевой*

Подписано к использованию 12.05.2023.
Объем данных 24 Мб.