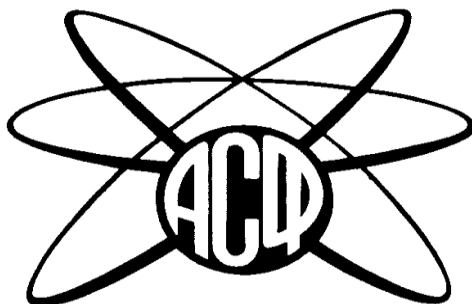


Ассоциация студентов-физиков и молодых учёных России
Институт электрофизики УрО РАН
Институт физики Южного Федерального университета

В Н К С Ф – 27

**Двадцать седьмая Всероссийская
научная конференция студентов-физиков и молодых учёных**



Россия

**Материалы конференции
Информационный бюллетень**

Екатеринбург

2023

РИНЦ
ISBN 978-5-93667-204-0
УДК 53
ББК В3я431
В 850

ОТВЕТСТВЕННЫЙ ЗА ВЫПУСК:
Александр Арапов

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ:

Связь по интернет, общее редактирование: Александр Арапов (Екатеринбург)

Обработка содержательной части тезисов по секциям: научные секретари – эксперты секций - члены научного комитета конференции ВНКСФ-27, данные о которых напечатаны в разделе *«Состав научного комитета конференции ВНКСФ-27»*, *страницы 13- 16*

Компьютерная верстка, редактирование: Арапов Александр, Арапова Елизавета, Бураева Елена (Ростов-на-Дону).

Составление информации первой части сборника: Арапов Александр.

Дизайн: Кайгородова Ольга (Екатеринбург), Александр Арапов, и творческий коллектив конференции.

Работа над диском, обработка базы данных флэш-диск: Арапова Елизавета, Арапов Александр.

Поддержка сайта: Александр Арапов.

Программирование, автоматизация: Алексей Исаков (Екатеринбург), Елизавета Арапова.

Сборник тезисов, материалы Двадцать седьмой Всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых (ВНКСФ-27, Екатеринбург): материалы конференции, тезисы докладов: В 1 т.Т.1 – Екатеринбург – Ростов-на-Дону: издательство АСФ России, 2023.

В сборнике представлены тезисы докладов, посвященных различным аспектам современной физики, представленные на Двадцать седьмой Всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых, проходившей в г. Екатеринбург, базе отдыха «Хрустальная» и Институте электрофизики УрО РАН с 3 по 6 апреля 2023 г., а также итоги конференции ВНКСФ-26 и материалы, посвященные деятельности АСФ России за 2022 год.

204 тезиса, **326** страниц формата А4. Копия сборника на флэш-диске с персональными анкетами и фото участников конференции, а также архивы конференций ВНКСФ: 11-26 прилагается. С публикацией на сайте http://asf.ural.ru/VNKSF/Tezis/tezis_v27.html

Сборник предназначен для преподавателей, аспирантов, студентов, научных работников и прочих интересующихся современной физикой людей, работающих в области физических наук и смежных с нею областях.

ВНКСФ-27 проводится при поддержке: Института электрофизики УрО РАН, Института физики Южного Федерального университета.

Оргкомитет конференции выражает благодарность всем ученым – физикам Екатеринбурга, Ростова-на-Дону и Российской Федерации за активное участие в конференции!

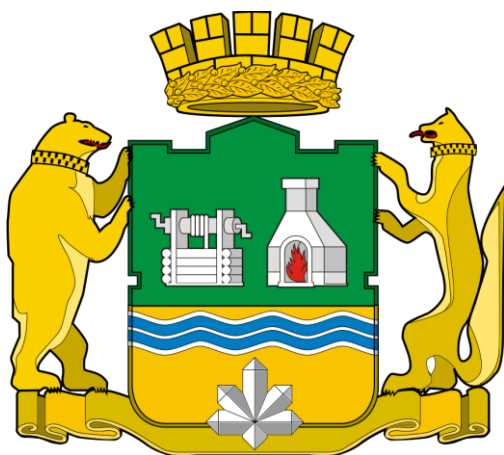
© Ассоциация студентов – физиков и молодых ученых России, 2023 г.

620063, Екатеринбург, а.я. 759, тел: (923) 422-74-34, e-mail: asf@asf.ur.ru

СОДЕРЖАНИЕ:

1. ВНКСФ опять на Урале! Добро пожаловать в Екатеринбург	5
Мероприятия АСФ России в 2022 году:	
2. Официальные итоги конференции ВНКСФ-26.2.....	7
Общая информация о конференции ВНКСФ-27:	
3. Состав оргкомитета ВНКСФ-27	11
4. Состав программного комитета ВНКСФ-27	12
5. Состав научного комитета ВНКСФ-27 и приглашенных лекторов	13
6. Пленарная программа (школа ВНКСФ-27)	17
7. Статистика заявок, докладов и участия ВНКСФ-27 по секциям	20
8. Статистика заявок, докладов и участия ВНКСФ-7 по городам.....	21
9. Статистика всех конференций ВНКСФ 1-27.....	23
Тезисы участников конференции ВНКСФ-27:	
10. Тезисы участников конференции с данными о каждом участнике конференции по секциям:	
01-Теоретическая физика, математическая физика.....	25
02-Физика конденсированного состояния вещества	31
03-Физика полупроводников и диэлектриков.....	63
04-Физика атомного ядра и элементарных частиц. Физика высоких энергий.	75
05-Электрофизика, электрофизические установки. Физика плазмы, плазменные технологии.	81
06-Магнетизм.	95
07-Оптика и спектроскопия	123
08-Квантовая электроника и лазерная физика	147
09-Физическая химия, химическая физика	149
10-Астрофизика, физика космоса, современные и перспективные космические исследования и технологии.....	161
11-Биофизика, медицинская физика	163
12-Геофизика: земная кора, океан, атмосфера	181
13-Акустика	195
14-Статистическая механика жидкости, газа и плазмы. Молекулярная физика.	197
15-Механика. Теоретическая механика. Механика жидкости, газа и плазмы. Инженерная механика	201
16-Материаловедение. Физика кристаллов. Наноматериалы и композиты.....	229
17- Радиофизика. Электроника.....	251
18-Приборы и методы экспериментальной физики. Информационные технологии в физических исследованиях	269
19-Теплофизика и теплотехника. Процессы теплообмена.....	287
20-Физика и экология. Экологические проблемы в энергетике.....	293
21-Проблемы и методологии преподавания физики. История физики и техники	319
Алфавитный указатель сборника по участникам конференции	325

Добро пожаловать на родину ВНКСФ!



ВНКСФ – снова в столице Урала!

И это неспроста, - после долгого периода ковидных ограничений речь идет, по сути, о возрождении нашей конференции. А Екатеринбург является родоначальником движения Ассоциации студентов-физиков России, здесь также зародилась идея проведения конференций ВНКСФ. Здесь же были проведены первые пять (!!!) конференций (1993-1999), а затем ВНКСФ-8 (2003), ВНКСФ-11 (2006), ВНКСФ-17 (2011). Уровень этих конференций оказался настолько высоким, что стал эталоном для проведения не только наших конференций в других городах, но также и для других конференций в России.

При этом, как не парадоксально, но ВНКСФ в Екатеринбурге не отличаются особой массовостью, зато особой атмосферой. Мы не боимся здесь экспериментировать, часто привносим новые элементы, людей. Именно на Екатеринбургских конференциях, как правило, зарождаются новые идеи, новые коллективы, а дружба между участниками ВНКСФ сохраняется на всю жизнь (иногда даже в семейном формате). Здесь – особая энергетика, особая атмосфера и все кругом кажется совершенно особенным и ни на что не похожим!

Екатеринбург, который часто называют «столицей Урала», расположен на стыке Европы и Азии. В 1723 году по указу Петра I на берегу реки Исеть был заложен железодельный завод, что стало началом истории города. Екатеринбург, через который проходил основной путь, связывавший Центральную Россию и Сибирь, по праву считался «окном в Азию».

В советское время город был переименован в Свердловск. Огромное значение для роста города имел период индустриализации (конец 20-х - начало 30-х годов). В это время были построены машиностроительные заводы Уралмаш и Уралэлектротяжмаш. Во время Великой Отечественной войны большое число заводов были эвакуированы из центральной части страны в Екатеринбург и другие города Урала, значительно усилив уральскую промышленность.

Сейчас Екатеринбург - уникальный, ультрасовременный город, где рядом с небоскребами живут уютные купеческие особняки 19 века, колыбель уральского рока и сказов Бажова, с широкими улицами и многочисленными скверами, между которыми в квадрате 10 на 10 км расположился миллион жителей (точнее 1,4 млн). Динамичный 2,5-миллионный мегаполис, географически очень выгодно расположен в «центре масс» университетов России. К нам одинаково «близко, или далеко» добираться как из Москвы, Питера, так и из Новосибирска, Томска, или Красноярска. Например, в интервале от 12 до 30 часов за сутки из столицы Урала можно на поезде доехать до: Москвы, Санкт-Петербурга, Казани, Нижнего Новгорода, Кирова, Самары, Уфы, Тюмени, Омска, Новосибирска, Кемерово, Томска и т.д. До Челябинска можно вообще доехать на автобусе за три часа, а до Перми за 5 часов... Крупнейший ультрасовременный аэропорт - "хаб" на Урале - "Кольцово". Очень развита сеть автомобильных дорог местного и федерального значения.

Екатеринбург один из самых студенческих городов в России - здесь около 40 университетов и несколько десятков колледжей. И, разумеется, Екатеринбург – один из самых «физических» городов. Так, например, в число организаторов ВНКСФ-23 входит Уральский федеральный университет имени Первого Президента России Б.Н. Ельцина. УрФУ является результатом слияния двух университетов: УрГУ и УГТУ-УПИ. Долгое время эти учреждения конкурировали между собой, борясь за неофициальное звание главного высшего учебного заведения города, но в 2010 году были объединены в одно учреждение, получившее статус федерального университета.

Институт естественных наук и математики Уральского федерального университета с 2011 года объединяет в себе физиков, химиков, биологов, а с 2016 года и математиков. Если говорить более конкретно, то основным организатором ВНКСФ в УрФУ является не весь ИЕНиМ, а один из его департаментов – "Физический факультет", который был образован еще в далеком 1931 году и

обладает хорошей историей и достижениями. И так уже получилось, что именно здесь, в 1991 году появилась АСФ России, а в 1993 году была учреждена ВНКСФ.

Кроме ИЕНиМа, расположенного по ул. Куйбишева-48а, прямое отношение к физике имеют: Физико-технологический институт (бывший крупнейший физтех УПИ), расположенный в составе основного исторического комплекса зданий УПИ, в самом начале проспекта Ленина и Институт радиоэлектроники и информационных технологий (радиофак). Также физики есть и физике учат во всех университетах, но наиболее часто также встречаются на физическом факультет УрГПУ и факультете геофизики УГГА (старейшая Горная академия, основанная в 1914 г.).

Но, конечно, больше физиков в Екатеринбурге именно в науке, в академических институтах: Институт электрофизики, Институт физики металлов, Институт геофизики, Институт теплофизики, Институт химии твёрдого тела, Институт высокотемпературной электрохимии, Институт органического синтеза, Институт металлургии, и др. В некоторых научных и учебных подразделениях физиков нам предстоит побывать во время конференции. Один из основных традиционных организаторов ВНКСФ – Институт электрофизики. Этот уникальный институт в системе РАН, был организован академиком Г.А. Месяцем и его коллегами в Екатеринбурге в 1986 году. Основные направления деятельности: - методы генерации мощных потоков корпускулярного и электромагнитного излучения, физика высоких плотностей энергии, проблемы импульсной энергетики, лазерная физика, нелинейная оптика, фазовые переходы и электродинамические процессы в конденсированных средах. В ИЭФ будет организовано несколько визитов.

Урал и его центральную часть - Свердловскую область не зря называют "опорным краем державы". По насыщенности заводов, промышленных предприятий различного направления наша область и Екатеринбург занимают ведущие позиции в России и мире. Не смотря на огромную территорию в Уральской тайге, горах, количество городских жителей составляет более 85%. Основа производства - металлургия, обработка металлов, машиностроение, электроника, транспортное машиностроение. И в этом Вы сможете убедиться в процессе организации экскурсий и визитов. Таких, например, как: Институт электрофизики УрО РАН, Коуровская астрономическая обсерватория УрФУ.

Во время конференции будут организованы авторские уникальные экскурсии не только в образовательные, научные и промышленные центры, но и по специальным маршрутам исторического, культурного и тематического характера: - об истории создания города и комплекса музеев на легендарной "Плотинке"; - о "каменной кладовой" Урала: - от скал "Чертово городище" до геологического музея, - в интересные и самобытные музеи наших выдающихся земляков: Бажова, Мамина-Сибирияка, Попова и даже Ельцина. Тематические прогулки – экскурсии: - по истории "Уральского рока", - истории и легенды по военной и космической технике, - традиций и трагедий Уральского туризма, спорта и многое другое.

В Екатеринбурге Вас ждут не только экскурсии, увлекательное общение и работа с коллегами на конференции и не только незабываемая культурная вечерняя программа, но также приятный отдых на базе отдыха «Хрустальная» с бассейном, крытым спортивным манежем, прокатом лыж, снегоходов и прогулках на лошадях. Вы можете также найти для себя время для увлекательных мини-путешествий по ближайшим горнолыжным базам, природным достопримечательностям Среднего Урала, к границе Европы и Азии и другим городам Свердловской области.

Добро пожаловать в Екатеринбург!

Добро пожаловать на Урал, край металлургов, романтиков и физиков!

2. Физика конденсированного состояния вещества

Студенты старших курсов

Тимофеев Вячеслав Сергеевич, магистрант 2 года обучения. **1 место**
Кемерово, Кемеровский государственный университет, Институт фундаментальных наук
Электронное строение и динамика решетки Be_2NCI
Гордиенко Алексей Болеславович, д.ф.-м.н.
e-mail: slava.timofeev.mail@gmail.com

Хаметова Элина Фанилевна, 1 курс. **2 место**
Ижевск, Удмуртский государственный университет, Институт математики и физики
Разработка метода решения задачи перекрывающихся диапазонов в EXELFS спектроскопии
Бакиева Ольга Ринатовна, к.ф.-м.н.
e-mail: elinaphanilevna851@gmail.com

Поляков Савелий Викторович, 2 курс. **3 место**
Кемерово, Кемеровский государственный университет, Институт фундаментальных наук
Электронная структура и химическая связь в BeAP_2 ($\text{A}=\text{C}, \text{Si}$)
Гордиенко Алексей Болеславович, д.ф.-м.н.
e-mail: savelij.polyakov@mail.ru

Аспиранты и молодые ученые

Аверкиев Игорь Кронидович, аспирант 2 года обучения. **1 место**
Ижевск, Удмуртский ФИЦ УРО РАН, Физико-технический институт
Исследование электронной и локальной атомной структуры соединений TiH_2 и Ti_2AlC методами рентгеноэлектронной и электронной спектроскопии
Бакиева Ольга Ринатовна, к.ф.-м.н.
e-mail: averkiev1997@mail.ru

Дмитриев Виктор Олегович, аспирант 2 года обучения. **2 место**
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
Особенности электронной структуры $\text{MeOx}/\text{МУНТ}$
Яловега Галина Эдуардовна, д.ф.-м.н.
e-mail: vdmitriev@sfedu.ru

3. Физика полупроводников и диэлектриков

Студенты старших курсов

Краснова Ирина Андреевна, магистрант 2 года обучения. **1 место**
Новосибирск, Новосибирский национальный исследовательский государственный университет
Исследование влияния собственного окисла на поверхность CdHgTe после жидкостного травления
Сидоров Георгий Юрьевич, Горшков Дмитрий Витальевич,
e-mail: i.krasnova@g.nsu.ru

7. Оптика и спектроскопия

Аспиранты и молодые ученые

Трофимова Елена Сергеевна, аспирант 4 года обучения. **1 место**
Москва, Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина, НИИ ядерной физики имени Д. В. Скобельцына МГУ, Физико-технологический институт
Люминесцентные свойства фосфатов, легированных редкоземельными ионами
Пустоваров Владимир Алексеевич, д.ф.-м.н.
e-mail: trofimova.e.s@yandex.ru

9. Физическая химия, химическая физика

Студенты старших курсов

Поздеев Вячеслав Алексеевич, 4 курс. **1 место**

Ижевск, Удмуртский государственный университет, Удмуртский ФИЦ, Институт математики и информационных технологий

Полимерные плёнки на железных подложках, полученные в плазме паров адамантана

Шаков Анатолий Анатольевич, к.ф.-м.н.

e-mail: pozdeev99va@gmail.com

Аспиранты, молодые ученые

Убович Милош, аспирант 2 года обучения. **1 место**

Санкт-Петербург, Санкт-Петербургский государственный университет, физический

Влияние добавления $Al(NO_3)_3$ на молекулярную подвижность в нитрате этиламмония по данным молекулярно-динамического моделирования

Чижик Владимир Иванович, д.ф.-м.н.

e-mail: ubovich.milosh@yandex.ru

Самойлова Мария Алексеевна, аспирант 4 года обучения. **2 место**

Екатеринбург, Институт металлургии УрО РАН, Институт металлургии УрО РАН

Вязкость расплавов $XMe_2O-(100-X)B_2O_3$ ($Me = Li, Na, K$)

Хохряков Александр Александрович, д.х.н.

e-mail: mari.makarenko.1993@mail.ru

11. Биофизика, медицинская физика

Студенты младших курсов

Лысенко Виктория Юрьевна, магистрант 1 года обучения. **1 место**

Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический

Локальное окружение ионов цинка в слоях арахидоновой кислоты: рентгеноспектральная диагностика

Яловега Галина Эдуардовна, д.ф.-м.н.

e-mail: viktoriya.250699@mail.ru

Аспиранты, молодые ученые

Пронина Екатерина Вячеславовна, аспирант 2 года обучения. **1 место**

Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический

Исследование дополнительных центров связывания ионов цинка в гемоглобине: рентгеновская спектроскопия поглощения

Яловега Галина Эдуардовна, д.ф.-м.н.

e-mail: ev_pronina_105@mail.ru

Кудояров Данил Шамилевич, аспирант 1 года обучения. **2 место**

Уфа, Башкирский государственный университет, Физико-технический институт

Визуализация молекул олигонуклеотидов dT12 и измерение их вольтамперных характеристик

Шарипов Талгат Ишмухамедович, к.ф.-м.н.

e-mail: danilkud@mail.ru

12. Геофизика: земная кора, океан, атмосфера

Студенты младших курсов

Ефимова Милана Владимировна, 3 курс. **1 место**

Уфа, Башкирский государственный университет, Физико-технический институт

Поиск гидродинамической связи между скважинами методами многопараметрической линейной регрессии и емкостно-резистивной модели

Питюк Юлия Айратовна, к.ф.-м.н.

e-mail: efimova.milana01@gmail.com

Студенты старших курсов

Корытников Антон Александрович, магистрант 2 года обучения. **1 место**
Октябрьский, Башкирский государственный университет, Физико-технический институт
Влияние положения автономных приборов в скважине на показания нейтронных методов
Антон Александрович Корытников, к.г.-м.н.
e-mail: anton.korytnikovv@gmail.com

15. Механика. Теоретическая механика. Механика жидкости, газа и плазмы. Инженерная механика

Студенты старших курсов

Фазлетдинов Спартак Уралович, 4 курс. **1 место**
Уфа, Башкирский государственный университет, Физико-технический институт
Численное моделирование защемления остаточной нефти в модели порового дублета
Питюк Юлия Айратовна, к.ф.-м.н.
e-mail: spartak.fazlet@gmail.com

Аспиранты, молодые ученые

Хисамов Артур Альфирович, аспирант 2 года обучения. **1 место**
Уфа, Башкирский государственный университет, ООО РН БашНИПИнефть, Физико-технический институт
Моделирование неустановившейся фильтрации в системе пласт - трещина ГРП
Хабибуллин Ильдус Лутфурахманович, д.ф.-м.н.
e-mail: khisamovartur@list.ru

Шахмаев Ришат Рафикович, аспирант 1 года обучения. **2 место**
Уфа, Башкирский государственный университет, Физико-технический институт
Электрогидродинамические процессы в водном мостике
Шайхитдинов Рамиль Зайниевич
e-mail: arteban2014@gmail.com

16. Материаловедение. Физика кристаллов. Наноматериалы и композиты

Студенты младших курсов

Митюшкин Евгений Олегович, 3 курс. **1 место**
Казань, Казанский (Приволжский) федеральный университет, Институт физики
Синтез наночастиц YVO₄, допированных ионами Yb и Er
Леонтьев Андрей Владимирович, к.ф.-м.н.
e-mail: m1tyushck1n@yandex.ru

Студенты старших курсов

Анофриев Виталий Александрович, магистрант 1 года обучения. **2 место**
Тверь, Тверской государственный университет, физико-технический
Адаптация метода триангуляции для анализа результатов моделирования эпитаксиального роста наноразмерных пленок
Сдобняков Николай Юрьевич, к.ф.-м.н.
e-mail: deyn1995@mail.ru

Денисова Алиса Олеговна, магистрант 1 года обучения. **2 место**
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
О наборе гидростатических параметров нового бессвинцового пьезоактивного композита со связностью 1-0-3
Тополов Виталий Юрьевич, д.ф.-м.н.
e-mail: alifived193@mail.ru

Недоедкова Ольга Вадимона, магистрант 2 года обучения. **3 место**
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
Особенности электронной структуры полианилина и композитов ПАНИ/Me (Cu, Zr):
исследования методами рентгеновской и УФ-видимой спектроскопии
Яловега Галина Эдуардовна, д.ф.-м.н.
e-mail: nedoedkova@sfedu.ru

17. Радиофизика. Электроника

Студенты старших курсов

Лазарева Анна Эдуардовна, 4 курс. **1 место**
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
Результаты исследования вариаций критических частот по данным вертикального зондирования
Радио Любовь Петровна, к.ф.-м.н.
e-mail: anna.anla.lazareva@mail.ru

Михайлов Максим Александрович, 4 курс. **2 место**
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
Электродинамический анализ и синтез полосно-пропускающего фильтра выполненного по SIW-технологии
Крутиев Сергей Владимирович, к.ф.-м.н.
e-mail: mikhailov.maksim.r@mail.ru

Сдобнова Варвара Павловна, 4 курс. **3 место**
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
Электродинамический анализ и синтез метаволноводного полосно-пропускающего фильтра
Крутиев Сергей Владимирович, к.ф.-м.н.
e-mail: sdobnova@sfedu.ru

18. Приборы и методы экспериментальной физики. Информационные технологии в физических исследованиях

Студенты младших курсов

Зув Владислав Олегович, 1 курс. **1 место**
Новосибирск, Новосибирский национальный исследовательский государственный университет,
физический
Программно-аппаратный комплекс для измерения трехмерной геометрии наледи
триангуляционными методами с использованием структурированного освещения
Двойнишников Сергей Владимирович, д.т.н.
e-mail: vlad.zuev.0017@mail.ru

19. Теплофизика и теплотехника. Процессы тепломассобмена

Студенты старших курсов

Ковальчук Татьяна Николаевна, 4 курс. **1 место**
Тюмень, Тюменский государственный университет, физико-технический институт
Физико-математическая модель пароциклической обработки с параллельным наклонным смещением фронта прогрева
Шевелев Александр Павлович, к.ф.-м.н.
e-mail: t.n.kovalchuk@mail.ru

Адрес центрального оргкомитета конференций ВНКСФ:

620063, Екатеринбург, а.я 759, Телефон: (863) 522-48-18, 8-923-422-74-34

E-mail: asf@asf.ur.ru <http://www.asf.ural.ru>

Председатель оргкомитета конференций ВНКСФ: Александр Арапов (АСФ России)

e-mail: arapov@asf.ur.ru, телефон: (863) 522-48-18, 8-923-422-74-34

Сектора деятельности оргкомитета:

- общая организация и диспетчерская служба, регистрация, в.т.ч.: - хозяйственные вопросы, размещение, питание, транспорт;
- информационно - техническая группа (компьютеры сеть, мульти-медиа, аудио -оборудование, фото, видео-съемка, редактирование материалов), работа с СМИ
- научная программа (в комплексе)
- культурная, спортивная программы, мини-путешествия, экскурсии (в комплексе)
- специальные программы (открытие, закрытие, Виртуальные дни физика, Генеральная конференция АСФ и другие)

Состав оргкомитета по городам

Екатеринбург:

Институт электрофизики УрО РАН:

Адрес: 620016, Екатеринбург, ул. Амундсена – 106, каб. 310. Телефон: (343) 267-8821

- **Кайгородова Ольга Анатольевна**, вед. инженер по патентной и изобретательной работе ИЭФ УрО РАН, тел: +7(922)223-96-83, e-mail: o.kaygorodova@gmail.com
- **Чепусов Александр Сергеевич**, м.н.с. Институт электрофизики УрО РАН, chepusov@iep.uran.ru

Уральский федеральный университет

- **Меренцов Александр Ильич**, с.н.с. лаборатории электрических явлений ИФМ УрО РАН, доцент кафедры физики и астрономии СУНЦ УрФУ, Екатеринбург, e-mail: alexander.merentsov@urfu.ru

Ростов-на-Дону:

- **Бураева Елена Анатольевна**, зав. лабораторией радиозокологических исследований НИИ физики ЮФУ, тел. 89185973011, e-mail: buraeva_elena@mail.ru,

Красноярск

- **Косырев Николай Николаевич**, к.ф.-м.н., н.с. лаб. магнитодинамики Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, г. Красноярск e-mail: kosyrev@inbox.ru

Тамбов

- **Воробьев Максим Олегович**, инженер, преподаватель. НИИ нанотехнологии и наноматериалы" Тамбовского государственного университета, г. **Тамбов**, школа № 3 г. Котовска, e-mail: vorob--yov@mail.ru

Екатеринбург, Институт электрофизики УрО РАН

- **Чайковский Станислав Анатольевич**, д.ф.-м.н. член. кор. РАН, директор Института электрофизики УрО РАН
- **Болтачев Грей Шамилевич**, д.ф.-м.н., зам. директора по научной работе ИЭФ УрО РАН
- **Некрасов Игорь Александрович**, д.ф.-м.н., член. кор. РАН

Ростов-на-Дону, Научно-исследовательский институт физики Южного федерального университета

- **Вербенко Илья Александрович**, д.ф.-м.н., директор НИИ физики Южного федерального университета
- **Бураева Елена Анатольевна**, к.х.н., зам. директора НИИ физики по научно-образовательной деятельности

Красноярск, Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН

- **Косырев Николай Николаевич**, к.ф.-м.н., н.с. лаб. магнитодинамики, Институт физики им Л. В. Киренского Красноярского научного центра СО РАН

1. Теоретическая физика, математическая физика

- **Некрасов Игорь Александрович**, д.ф.-м.н., член.-корр. РАН, в.н.с. Института электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, e-mail: Nekrasov@iep.uran.ru
- **Гусаревич Евгений Степанович***, к.ф.-м.н., с.н.с., доцент кафедры теоретической физики Северного (Арктического) федерального университета им. М.В. Ломоносова, г. Архангельск, e-mail: gusarevich@gmail.com, (АСФ России) (онлайн)

2. Физика конденсированного состояния вещества

- **Некрасов Игорь Александрович**, д.ф.-м.н., член.-корр. РАН, в.н.с. Института электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, e-mail: Nekrasov@iep.uran.ru
- **Катков Всеволод Леонидович**, к.ф.-м.н., с.н.с., лаб. теоретической физики сектора физики наноструктур. Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, e-mail: katkov@theor.jinr.ru
- **Меренцов Александр Ильич**, к.ф.-м.н., с.н.с. лаборатории электрических явлений ИФМ УрО РАН, доцент кафедры физики и астрономии СУНЦ УрФУ, Екатеринбург, e-mail: alexander.merentsov@urfu.ru (АСФ России)

3. Физика полупроводников и диэлектриков

- **Перевалов Тимофей Викторович**, к.ф.-м.н., с.н.с., Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения РАН, г. Новосибирск e-mail: timson@isp.nsc.ru (онлайн)
- **Исламов Дамир Ревинирович**, к.ф.-м.н., с.н.с. Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения РАН, г. Новосибирск (АСФ России), e-mail: damir@isp.nsc.ru (АСФ России)

4. Физика атомного ядра и элементарных частиц . Физика высоких энергий

- **Малышевский Вячеслав Сергеевич**, д.ф.-м.н., зав. каф. общей физики, физический факультет Южного федерального университета, г. Ростов-на-Дону, e-mail: vsmaryshevsky@sfedu.ru (онлайн)
- **Осипов Алексей Сергеевич***, директор Научно- производственное отделения развития технологий радиотерапии АО НИИТФА г. Москва e-mail: okdf2007@mail.ru (АСФ России)

5. Физика плазмы, электрофизика, плазменные технологии

- **Зубарев Николай Михайлович**, д.ф.-м.н., член-кор. РАН, г.н.с., Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, e-mail: nick@iep.uran.ru
- **Чепусов Александр Сергеевич**, к.т.н., н.с. Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, e-mail: chepusov@iep.uran.ru (АСФ России)

6. Магнетизм

- **Овчинников Александр Сергеевич**, д.ф.-м.н., профессор, каф. теоретической и математической физики ИЕНиМ УрФУ, **Екатеринбург**, e-mail: alexander.ovchinnikov@urfu.ru
- **Косырев Николай Николаевич**, к.ф.-м.н., н.с., лаб. магнитодинамики Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, г. **Красноярск**, e-mail: kosyrev@inbox.ru

7. Оптика и спектроскопия

- **Соломонов Владимир Иванович**, д.ф.-м.н., в.н.с., Институт электрофизики УрО РАН, г. **Екатеринбург**, e-mail: plasma@ier.uran.ru
- **Меренцов Александр Ильич**, с.н.с. лаборатории электрических явлений ИФМ УрО РАН, доцент кафедры физики и астрономии СУНЦ УрФУ, **Екатеринбург**, e-mail: alexander.merentsov@urfu.ru (*АСФ России*)

8. Квантовая электроника и лазерная физика

- **Телегин Андрей Владимирович**, к.ф.-м.н., в.н.с., зав. лаб. магнитных полупроводников Институт физики металлов УрО РАН, г. **Екатеринбург**, e-mail: telegin@imp.uran.ru

9. Физическая химия, химическая физика

- **Лебедев Михаил Сергеевич**, к.х.н., н.с., Институт неорганической химии им А. В. Николаева СО РАН. г. **Новосибирск**, e-mail: lebedev@niic.nsc.ru
- **Буряева Елена Анатольевна**, к.х.н., доцент, зав. лаб. радиэкологических исследований, зам. директора НИИ физики Южного федерального университета, г. **Ростов-на-Дону**, e-mail: buraeva_elena@mail.ru (*АСФ России*) (*онлайн*)

10. Астрофизика, физика космоса

- **Попова Мария Эриковна**, к.ф.-м.н., с.н.с. Астрономическая обсерватория, Уральский федеральный университет, e-mail: maria.popova@urfu.ru
- **Арапов Александр Григорьевич**, председатель АСФ России, e-mail: arapov@asf.ur.ru

11. Биофизика, медицинская физика

- **Закирьянов Фарит Кабирович**, к.ф.-м.н., доцент каф. теор. физики ФТИ, Уфимский университет науки и технологий, г. **Уфа** e-mail: farni@rambler.ru (*АСФ России*) (*онлайн*)

12. Геофизика: земная кора, океан, атмосфера

- **Петрова Галина Григорьевна***, к.ф.-м.н., доцент кафедры общей физики физического факультета, ЮФУ, г. **Ростов-на-Дону**, e-mail: georgpu@rambler.ru (*онлайн*)
- **Панчишкина Ирина Николаевна***, к.ф.-м.н., доцент кафедры общей физики физического факультета, Южный федеральный университет, г. **Ростов-на-Дону** e-mail: georgpu@rambler.ru (*онлайн*)

- **Тарантин Михаил Викторович***, к.т.н., научный сотрудник, Горный институт УрО РАН, г. Пермь, e-mail: gptmv@mi-perm.ru (АСФ России) (онлайн)

13. Акустика

- **Галимзянов Марат Назипович**, и. о. директора ИМех УФИЦ РАН, к.ф.-м.н., доцент e-mail: monk@anrb.ru
- **Ильин Владимир Алексеевич**, к.ф.-м.н., доцент, кафедры физики фазовых переходов, физический факультет ПермГУ, Пермь e-mail: ilin1@psu.ru (АСФ России) (онлайн)

14. Статистическая механика жидкости, газа и плазмы. Молекулярная физика

- **Ильин Владимир Алексеевич**, к.ф.-м.н., доцент, кафедры физики фазовых переходов, физический факультет ПермГУ, Пермь e-mail: ilin1@psu.ru (АСФ России) (онлайн)

15. Механика. Теоретическая механика. Механика жидкости, газа и плазмы. Инженерная механика.

- **Галимзянов Марат Назипович**, и. о. директора ИМех УФИЦ РАН, к.ф.-м.н., доцент e-mail: monk@anrb.ru
- **Ильин Владимир Алексеевич**, к.ф.-м.н., доцент, кафедры физики фазовых переходов, физический факультет ПермГУ, Пермь e-mail: ilin1@psu.ru (АСФ России) (онлайн)

16. Материаловедение . Физика кристаллов. Наноматериалы и композиты.

- **Яловега Галина Эдуардовна**, д.ф.-м.н., зав. каф. физики наносистем и спектроскопии, физический факультет Южного федерального университета, г. Ростов-на-Дону. e-mail: yalovega1968@mail.ru (онлайн)
- **Смовж Дмитрий Владимирович**, к.ф.-м.н., зав. лаб., Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе Сибирского отделения РАН, г. Новосибирск, e-mail: smovzh@itp.nsc.ru
- **Габдрахманова Лилия Айратовна**, к.ф.-м.н., доцент каф. инфокоммуникационной технологии и наноэлектроники Физико-технического института Башкирского государственного университета, Уфа e-mail: la-gabdrahmanova@mail.ru (онлайн)
- **Полянский Дмитрий Александрович***, к.ф.-м.н., доцент департамента Общей и экспериментальной физики ИНТиПМ, Дальневосточный федеральный университет, Школа естественных наук, г. Владивосток, e-mail: rambo192@mail.ru (онлайн)

17. Радиофизика

- **Голицын Александр Андреевич**, к.т.н., н.с., Институт физики полупроводников СО РАН, доцент каф. электротехнических комплексов, Новосибирский государственный технический университет, Новосибирский национальный исследовательский университет г. Новосибирск e-mail: aag-09@yandex.ru (АСФ России) (онлайн)

18. Приборы и методы экспериментальной физики. Информационные технологии в физических исследованиях

- **Голицын Александр Андреевич**, к.т.н., н.с., Институт физики полупроводников СО РАН, доцент каф. электротехнических комплексов, Новосибирский государственный технический университет, Новосибирский национальный исследовательский университет **Новосибирск**
e-mail: aag-09@yandex.ru (АСФ России) (онлайн)
- **Шауро Виталий Павлович**, к.ф.-м.н., Институт физики СО РАН, **Красноярск**
e-mail: Shaurkin@hotmail.com , (АСФ России) (онлайн)

19. Теплофизика и теплотехника. Процессы тепломассобмена

- **Смовж Дмитрий Владимирович**, д.ф.-м.н., зав. лаб., Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе Сибирского отделения РАН, г. **Новосибирск**, e-mail: smovzh@itp.nsc.ru
- **Анкудинов Владимир Евгеньевич***, к.ф.-м.н., н.с. теоретический отдел, Институт физики высоких давлений им. Верещагина РАН, г. **Москва**,
e-mail: vladimir@ankudinov.org (АСФ России) (онлайн)

20. Физика и экология. Экологические проблемы в энергетике

- **Буряева Елена Анатольевна**, к.х.н., доцент, зав. лаб. радиэкологических исследований, зам. директора НИИ физики Южного федерального университета, г. **Ростов-на-Дону**,
e-mail: buraeva_elena@mail.ru (АСФ России) (онлайн)

21. Проблемы и методологии преподавания физики

- **Аржаник Алексей Ремович**, к.п.н., зав. каф. физики и методики обучения по физике Томского государственного педагогического университета, г. **Томск**, e-mail: iii_75@inbox.ru
- **Воробьев Максим Олегович**, инженер, преподаватель. НИИ нанотехнологии и наноматериалы" Тамбовского государственного университета, г. **Тамбов**, школа № 3 г. Котовска, e-mail: vorob--yov@mail.ru (АСФ России)

Примечания:

- *курсивом отмечены* (или АСФ России) члены научного комитета, которые участвуют в нем по приглашению АСФ России (или являются членами АСФ) и представляют мнение Ассоциации в научном комитете конференции.

Они же являются научными секретарями секций (предварительное рассмотрение тезисов, их редактирование, работа с научным комитетом своей секции и на самой конференции – проведение секции).

Пленарная программа (школа) ВНКСФ-27
2. Физика конденсированного состояния вещества

Некрасов Игорь Александрович, д.ф.-м.н., член-корр. РАН в.н.с. Института электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург. e-mail: nekrasov@iep.uran.ru

Простейшие представления о взаимодействии электромагнитного излучения с композитными материалами

Москвин Александр Сергеевич, д.ф.-м.н., профессор каф. теоретической и математической физики ИЕНиМ УрФУ, зав.отделом математического моделирования НИИ ФПМ, Екатеринбург, e-mail: alexander.moskvin@urfu.ru

Сверхпроводимость, вчера, сегодня, завтра

Катков Всеволод Леонидович, к.ф.-м.н., с.н.с. лаб. теоретической физики сектора физики наноструктур. Объединенный институт ядерных исследований, Дубна. e-mail: katkov@theor.jinr.ru

Квантово-разерный эффект в случае туннельного магнитного сопротивления

3. Физика полупроводников и диэлектриков (включая наносистемы)

Исламов Дамир Ревнирович, к.ф.-м.н., с.н.с. Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения РАН, г. Новосибирск, e-mail: damir@isp.nsc.ru

Сегнетоэлектрическая память FRAM – кандидат на роль универсальной памяти

5. Электрофизика, электрофизические установки. Физика плазмы, плазменные технологии

Зубарев Николай Михайлович, д.ф.-м.н., член-корр. РАН, г.н.с. Институт электрофизики УрО РАН e-mail: nick@iep.uran.ru

Условия и динамика убегания электронов в газе в условиях резко неоднородного электрического поля

6. Магнетизм

Стрельцов Сергей Владимирович, д.ф.-м.н., член-корр. РАН, профессор, г.н.с., зав.лаб. теории низкоразмерных спиновых систем ИФМ УрО РАН, г. Екатеринбург. e-mail: streltsov.s@gmail.com

Всё, что можно рассказать о магнетизме (локализованных электронов) за 60 минут

Овчинников Александр Сергеевич, д.ф.-м.н., профессор, каф. теоретической и математической физики ИЕНиМ УрФУ, Екатеринбург, e-mail: alexander.ovchinnikov@urfu.ru

Виды спиновых возбуждений в хиральных гелимагнетиках

Панов Юрий Демьянович, к.ф.-м.н., доцент Института естественных наук и математики УрФУ, e-mail : Yuri.Panov@urfu.ru

Псевдопереходы в одномерных спиновых моделях

Косырев Николай Николаевич, к.ф.-м.н., н.с., лаб. магнитодинамики Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, г. Красноярск, e-mail: kosyrev@inbox.ru

Поляризационные методы исследования магнитных наноструктур

Лукоянов Алексей Владимирович, к.ф.-м.н., в.н.с., зав. лаб. оптики металлов Института физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург. e-mail: lukoyanov@imp.uran.ru

Магнитокалорическое сжижение газов

7. Оптика и спектроскопия

Соломонов Владимир Иванович, д.ф.-м.н., в.н.с., Институт электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, e-mail: plasma@iep.uran.ru

Токовый режим работы фотоэлектронного умножителя для измерения кинетики слабых световых сигналов

Меренцов Александр Ильич, к.ф.-м.н., с.н.с. лаб. электрических явлений ИФМ УрО РАН, доцент кафедры физики и астрономии СУНЦ УрФУ, Екатеринбург, e-mail: alexander.merentsov@urfu.ru

Формирование структурных фрагментов в дихалькогенидах титана, замещённых 3d-переходными металлами

Петрова Ольга Викторовна, к.ф.-м.н., научный сотрудник лаборатории экспериментальной физики Физико-математический институт ФИЦ Коми НЦ УрО РАН, г. Сыктывкар teiou@mail.ru

Ультралагкая рентгеновская спектроскопия поглощения наноструктурированных материалов и биологических объектов

Макаров Павел Андреевич, к.ф.-м.н., ФМИ ФИЦ Коми НЦ УрО РАН, с.н.с. лаб. Экспериментальной физики, г. Сыктывкар makarovpa@ipm.komisc.ru.

Применение современного открытого программного инструментария в XAFS спектроскопии: теория, моделирование и анализ экспериментальных данных

8. Квантовая электроника и лазерная физика

Телегин Андрей Владимирович, к.ф.-м.н., в.н.с., зав. лаб. магнитных полупроводников Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, e-mail: telegin@imp.uran.ru

Сверхбыстрая магнитооптика в ферромагнитных шпинелях

9. Физическая химия, химическая физика

Лебедев Михаил Сергеевич, к.х.н., н.с., Институт неорганической химии им А. В. Николаева СО РАН. г. Новосибирск, e-mail: lebedev@niic.nsc.ru

Физико-химические основы и примеры практического применения технологии атомно-слоевого осаждения

11. Биофизика, медицинская физика

Закирьянов Фарит Кабирович, к.ф.-м.н., доцент каф. теоретической физики ФТИ Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа, e-mail: farni@rambler.ru

Теоретические и экспериментальные исследования проводимости ДНК

18. Приборы и методы экспериментальной физики. Информационные технологии в физических исследованиях

Полянский Дмитрий Александрович, к.ф.-м.н., доцент департамента общей и экспериментальной физики ИНТиПМ, Дальневосточный федеральный университет, Школа естественных наук, г. Владивосток, e-mail: rambo192@mail.ru

Актуальные аспекты защиты информации от технической разведки в условиях ограниченной контролируемой зоны

19. Теплофизика и теплотехника. Процессы тепломассобмена

Смовж Дмитрий Владимирович, к.ф.-м.н., зав. лаб., Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе Сибирского отделения РАН, г. **Новосибирск**, e-mail: smovzh@itp.nsc.ru

Теплофизические применения графена, полученного методом ХОГФ

20. Физика и экология

Бураева Елена Анатольевна, к.х.н., доцент, зав. лаб. радиозэкологических исследований, зам. директора НИИ физики Южного федерального университета, г. **Ростов-на-Дону**, e-mail: burueva_elena@mail.ru

Радионуклиды в съедобных и условносъедобных грибах

21. Проблемы и методология преподавания физики

Воробьев Максим Олегович, инженер, преподаватель. НИИ нанотехнологии и наноматериалы" Тамбовского государственного университета, г. **Тамбов**, школа № 3 г. Котовска, e-mail: vorob--yov@mail.ru

Особенности преподавания физики в разные исторические периоды

Примечания:

- *курсивом отмечены* (или АСФ России) члены научного комитета, которые участвуют в нем по приглашению АСФ России (или являются членами АСФ) и представляют мнение Ассоциации в научном комитете конференции.

Они же являются научными секретарями секций (предварительное рассмотрение тезисов, их редактирование, работа с научным комитетом своей секции и на самой конференции – проведение секции).

Информация по количеству заявок и докладов по секциям ВНКСФ-27

Секция	заявки	тезисы	Устные доклады*	Обзорные, пленарные	стендовые	заочные
01 - Теоретическая физика. Математическая физика	4	4	4 (1/3)			0
02 - Физика конденсированного состояния вещества	28	27	12 (6/6)	4	7	8
03 - Физика полупроводников и диэлектриков	8	8	5 (0/5)	1	1	1
04 - Физика атомного ядра и элементарных частиц, высоких энергий.	4	4	2 (1/1)			2
05 - Электрофизика. Физика плазмы, плазменные технологии.	8	8	7 (4/3)	1	1	
06- Магнетизм.	21	20	6 (5/1)	5 (1-онлайн)	4	10
07 - Оптика и спектроскопия.	18	17	13 (10/3)	4	1	2
08 - Квантовая электроника и лазерная физика.	1	1		1		1
09 - Физическая химия, хим. физика.	8	8	3 (3/0)	1		4
10 - Астрофизика, физика космоса Космические технологии	1	1	1 (0/1)	1		
11 - Биофизика, медицинская физика.	12	12	8 (3/5)	1 (онлайн)		4
12 - Геофизика: земная кора, океан, атмосфера.	8	8	5 (2/3)			3
13 - Акустика.	1	1	1 (1/0)			
14 - Статистическая механика жидкости, газа и плазмы. Молекулярная физика.	1	1				1
15 - Механика. Теоретическая механика. Механика жидкости, газа и плазмы. Инженерная механика.	21	20	15 (5/10)	1		5
16 - Материаловедение. Физика кристаллов. Наноматериалы, композиты.	17	16	14 (5/9)			2
17 - Радиофизика. Электроника.	11	11	9 (2/7)			2
18 – Приборы и методы экспериментальной физики. Информационные технологии в физических исследованиях.	11	11	2 (1/1)	1(онлайн)		7
19 - Теплофизика и теплотехника. Процессы теплообмена.	4	3	2 (2/0)	1		1
20 - Физика и экология	19	18	3 (0/3)	1(онлайн)	1	13
21 – Проблемы и методологии преподавания физики. История физики.	3	3	1 (1/0)	1		1
Всего, по всем секциям	210/231	204	113 (50/63)	25 (4)	16	67

Примечания:

- в столбце **устные доклады** в скобках указаны (количество **очных** докладов/количество **онлайн** докладов)
- в итоговом количестве заявок ВНКСФ-27 в скобках дополнительно учтено количество ученых, принимающих участие в конференции, но не прошедших регистрацию в базе данных (+__ человек, в том числе _ онлайн)

**Статистика заявок, тезисов и докладов ВНКСФ-27
по городам и регионам (с востока на запад)**

Город	заявки	тезисы	очные	заочные
Дальний Восток, Забайкалье				
Владивосток	7	7	4(4)	3
Всего по региону:	7	7	4	3
Сибирь				
Красноярск	7	5	5	0
Томск	38	37	30(11)	7
Кемерово	1	1	0	1
Барнаул	1	1	0	1
Новосибирск	9	9	7(1)	2
Всего по региону:	56	53	37(12)	11
Большой Урал				
Екатеринбург	28	27	33*	4
Тюмень	2	2	1	1
Первоуральск	1	1	1	0
Челябинск	2	1	1	0
Пермь	1	1	1	0
Сыктывкар	4	4	4	0
Уфа	39	38	23(19)	15
Стерлитамак	1	1	0	1
Ижевск	7	7	7(2)	0
Октябрьский	1	1	0	1
Всего по региону	86	83	71	22
Северный регион				
Великий Новгород	5	5	0	5
Архангельск	1	1	1	0
Калининград	1	1	0	1
Всего по региону	7	7	1	6
Поволжье				
Казань	2	2	2(2)	0
Самара	1	1	1(1)	0
Всего по региону	3	3	3	0
Центральная часть России				
Дубна	1	1	1	0
Москва	2	2	0	2
Воронеж	1	1	1(1)	0
Тамбов	1	1	1	0
Всего по региону:	5	5	4	2
Южный регион				
Ростов-на-Дону	45	42	25(19)	17
Ставрополь	1	1	0	1
Краснодар	1	1	0	1
Всего по региону:	47	44	25	19

Примечания:

- все города внутри региона расположены не по алфавиту, а по географическому расположению с востока на запад (примерно);
- * в количество очных участников также входят члены оргкомитета и научного комитета конференции, поэтому оно может отличаться от количества докладов (как правило в большую сторону). Эта цифра отмечена звездочкой
- ** в некоторых случаях один человек может представить два доклада, в количество докладов также включены доклады ученых от данного города, которые не проходят общую регистрацию (приглашенные докладчики)
- в колонке «очные доклады» в скобках указаны доклады – онлайн (через интернет).
- жирным шрифтом выделены города – лидеры по количеству участников в своих регионах.

Статистика всех конференций ВНКСФ 1 – 27

ВНКСФ	27	26	25	24	23	22	21	20	19	18	17	16	15	14	13	12	11	10	9	8	7	6	5	4	3	2	1
	2023	2020	2019	2018	17	16	15	14	13	12	11	2010	09	08	07	06	05	04	03	02	01	2000	99	96	95	94	93
стран	2	1	4	5	3	2	2	7	5	6	5	7	6	7	6	7	6	5	2	3	5	1	1	3	6	5	2
городов	28	35	50	41	42	54	51	60	62	67	63	84	79	72	75	76	69	77	65	58	69	33	24	27	33	29	27
ВУЗов	28	55	64	52	54	64	63	76	79	106	90	122	119	108	101	100	99	117	66	72	98	40	30	32	39	38	20
НИИ и НИЛ	21	15	26	20	24	21	27	31	37	32	35	42	40	44	38	46	44	46	34	37	21	7	4	3	5	7	2
заявок на участие	210	318	384	466	432	478	448	475	383	496	483	655	694	588	611	685	664	825	773	496	650	315	221	142	159	130	58
принятых тезисов	204	289	331	401	343	396	380	422	336	472	455	562	623	486	497	581	516	649	540	338	464	240	173	133	120	117	61
Очных участников*	50/63	169	231	287	218	280	207	183	188	271	227	254	284	248	262	295	250	320	190	130	300	90	60	50	140	120	60
Участвующих ученых**	39	82	81	98	83	110	52																				
Конкурсных докладов*	113	180	220	305	221	288	376	411	324	465	449	544	606	473	491	580	516	649	540	338	464	240	173	133	120	117	61
Обзорных и пленарных**	21	58	71	91	60	78	28																				
из них заявок:																											
Россия	210	318	378	458	428	475	373	466	376	451	441	531	577	461	474	561	490	637	536	334	444		173	129	111	110	55
Белоруссия				4	1	3	3	1		1	3	5	9	4	4	7	15	3	4	3	8		0	0	1	5	0
Казахстан			1					5	2	7	1	2	8	2	8	8	8	2									
Армения									1	2				2													
Азербайджан										1																	
Украина			2					1	7		3	6	9	0	2	2	2	3								3	3
Киргизстан														3	3	1	1	1									
Узбекистан				2	3			2	2	3	2			0	1	1	1	1									
США, Канада									1					1		1										1	
страны Европы													1				1										
Китай	4*	1*	1	2																							
Вьетнам			2	1																							
Европейская часть России	12	5	34	28	33	47	26	76	96	52	60	77	89	65	81	84	28		91	166	283		120	61	77	56	27
Поволжье	3	18	17	12	21	39	19	43	31	32	54	99	39	31	46	63	28		22	*	*		*	*	*	*	*
Южный регион	47	47	67	46	79	233	62	67	46	29	41	65	47	32	89	83	71		68	*	*		*	*	*	*	*
Урал	86	176	80	76	175	94	95	153	91	84	147	122	106	182	106	101	90		70	168	161		53	66	34	54	28
Сибирь	56	50	121	273	108	54	163	108	90	237	130	130	261	126	142	198	157		269	**	**		**	**	**	**	**

Дальний восток	7	6	7	13	9	10	15	20	24	29	22	37	33	22	27	27	19		17	**	**		**	**	**	**	**
Республика Крым, Севастополь	0	5	56	7	6	6	5																				
ВНКСФ, №	27	26	25	24	23	22	21	20	18	17	16	15	14	13	12	11	10	9	8	7	6	5	4	3	3	2	1
Распределение заявок по возрасту участников																											
школьников	-	-	3	2	2	-	1	-	-	4	1	1	5	1	2		1	2	2	1	0	6	0	0	0	1	0
1 курс	7	15	17	23	12	4	6	5	4	2	3	1	2	1	1	4	5	6	13	8	0	5	4	1	0	1	0
2 курс	10	22	29	43	30	30	17	27	8	5	10	12	10	11	11	10	7	14	24	16	7	22	4	5	5	3	1
3 курс	19	27	42	48	49	33	53	29	19	34	23	15	24	19	27	29	16	53	25	20	20	24	18	6	15	10	4
4 курс	54	79	51	97	83	112	79	58	36	64	52	70	87	52	59	86	55	84	73	55	45	52	36	29	34	24	17
5 курс, маг 1*	32	45	77	58	75	76	39	44	46	49	65	89	131	84	122	84	82	152	135	87	31	0	38	50	52	41	40
6 курс, маг 2*	15	36	44	55	52	46	12	6	20	27	30	43	37	25	32	56	21	53	43	22	50	0	10	5	7	6	2
аспирант 1-2*	26	27	39-14	54	46	31	80	61	65	65	62	63	36	32	26	21	52	52	43	52	69	116	17	0	0	0	0
аспирант 3-4*	10	16	9-3	28	24	33	99	117	88	150	143	163	164	152	135	169	193	280	289	175	197	69	64	35	35	28	14
прочих	37	52	61	51	54	77	69	77	97	63	61	87	101	96	76	75	74	130	126	60	20	18	4	2	6	4	1
из них:																											
женщин	111	146	198	202	170	219	176	177	144	187	167	201	244	183	177	178	178	300	248	161	113	85	46	23	26	23	15
Средний возраст	99	22,3	23,1	23	22,1	22,5	23,2	23,6	23,7	23,5	23,8	24	23	24	24,2	22	23	23	22	23	24,7	23,4	23	23,5	21,6	22,3	22

Примечания:

В статистике конференций ВНКСФ 1–8 по регионам:

- в Европейскую часть России входили Поволжский и Южный регионы (*), а Урал, Сибирь и Дальний Восток были объединены в один регион (Азиатская часть России) (**);
- в «Европейскую часть» РФ входят т.н. Центральный и Северный федеральные округа;
- к Дальневосточному региону здесь также относится Якутия.

- в **2023** году в строке «очные доклады» перед дробью указаны очные участники, а после дроби – участники выступавшие через интернет (онлайн)

По количеству участников по форме участия:

- в очные участники входят участники с полным пансионом (иногородние) и с неполным пансионом (местные, или иногородние на неполный срок)
- в количество конкурсных докладов входят устные и стендовые доклады (с 2016 года, до этого года – сюда входили и заочные участники)
- с 2015 года в статистику включается также количество ученых, которые принимали участие в конференции без регистрации в базе данных (участие в работе научного жюри, лекции и т.д.). Это количество ученых идет **ДОПОЛНИТЕЛЬНО** к общему количеству участников конференции
- с 2015 года в статистику включаются обзорные и пленарные доклады ученых (дополнительное количество докладов, вне регистрации), данная информация по прошлым конференциям будет заполняться постепенно, по архивным данным

По участникам по возрастам и категориям учащихся:

- с 2016 года 5 курс объединен с магистрантами 1 года обучения
- с 2016 года 6 курс объединен с магистрантами 2 года обучения
- с 2016 года аспиранты разделены на две возрастные категории: 1-2 года обучения и 3-4 года обучения

1-Теоретическая физика. Математическая физика

Зиннатуллин Руслан Рамилевич, 1 курс

Уфа, Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы, институт физики, математики и нанотехнологий

Приливные силы кротовой норы Калба-Рамонда

Каримов Рамис Хамитович, к.ф.-м.н.

e-mail: m-var@list.ru

стр. 26

Кислякова Дарья Павловна, магистрант 1 года обучения

Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический

Квазиклассический предел в модели изотропной Вселенной со скалярным полем в рамках различных подходов

Шестакова Татьяна Павловна, к.ф.-м.н.

e-mail: dkislyakova@sfnu.ru

стр. 27

Самигуллина Анжела Ильгизовна, 3 курс

Уфа, Уфимский университет науки и технологий, физико-технический институт

Исследование основного состояния и устойчивости решеток магнитных скирмионов в магнитоэлектрических бислоях

Шарафуллин Ильдус Фанисович, д.ф.-м.н.

e-mail: angelasamig2002@gmail.com

стр. 27

Тинюкова Татьяна Сергеевна, доцент

Ижевск, Удмуртский государственный университет, институт математики, информационных технологий и физики

Неэрмитовый гамильтониан Хатано-Нельсона

e-mail: ttinyukova@mail.ru

стр. 28

Приливные силы кротовой норы Калба-Рамонда

Зиннатуллин Руслан Рамилевич

Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы

Каримов Рамис Хамитович, к.ф.-м.н.

m-var@list.ru

Приливные силы – силы, возникающие в телах, свободно движущихся в неоднородном силовом поле. В самом общем случае приливные силы представляют собой силы, вызывающие эффекты, проявляющиеся при воздействии неоднородного силового поля на протяжённый объект, независимо от того, какое движение он совершает и чем это поле вызвано. В качестве источника неоднородного силового поля может выступать кротовая нора. В нашей работе проведено исследование приливных сил вблизи горловины кротовой норы Калба-Рамонда.

Метрика проходимой кротовой норы Калба-Рамонда имеет вид [1]:

$$ds^2 = -dt^2 + \left[1 - \left(\frac{r}{r_0}\right)^{\frac{2}{1-2\lambda}}\right]^{-1} dr^2 + r^2(d\theta^2 + \sin^2\theta d\varphi^2), \quad (1)$$

где r_0 – радиус горловины кротовой норы и λ – параметр возмущения, вызванный нарушением симметрии Лоренца. В работе [1] решение (1) искалось изначально из условия, что приливные силы такой кротовой норы будут равны 0. Мы в нашей работе покажем, что не все компоненты приливных сил удовлетворяют этому условию.

Для исследования приливных сил рассмотрим метод Горовица и Росса [2]. Согласно методу, форма вычисления квадрата интервала вдали от сильных полей тяготения имеет вид:

$$ds^2 = -\frac{F(r)}{G(r)} dt^2 + \frac{1}{F(r)} dr^2 + R^2(r)(d\theta^2 + \sin^2\theta d\varphi^2), \quad (2)$$

где компоненты $F(r)$, $G(r)$ и $R(r)$ определяются метрикой (1).

Кривизна полностью характеризуется компонентами тензора Римана в ортонормированной системе. Из всех ненулевых компонентов кривизны был взят один компонент тензора кривизны, являющийся ненулевым, $R_{\hat{0}\hat{2}\hat{0}\hat{2}}$, имеющим вид:

$$R_{\hat{0}\hat{2}\hat{0}\hat{2}} = \frac{1}{R} \left[\frac{R'}{2} (E_5^2 G' - F') \right] - \frac{1}{R} \left(R'' G + \frac{R' G'}{2} \right) E_{Ex}^2 = R_{0202}^{(S)} + R_{0202}^{(Ex)}, \quad (3)$$

где E_5^2 – величина сохраненной энергии в неподвижной системе координат, E_{Ex}^2 – представляет увеличение E_5^2 из-за геодезического движения. Соответственно, для кротовой норы Калба-Рамонда можно получить

$$R_{0202}^{(S)} = \frac{1}{1-2\lambda} \frac{r}{r_0^2} \left(1 - \frac{r}{r_0}\right)^{\frac{2(2-\lambda)}{2\lambda-1}}, \quad R_{0202}^{(Ex)} = 0. \quad (4)$$

Из уравнения (4) следует, что слагаемое, вызванное внешними силами равно 0, однако статическая компонента $R_{0202}^{(S)} \neq 0$, что говорит о том, что на пробную частицу, пролетающую вблизи горловины кротовой норы, будут воздействовать ненулевые приливные силы. Следовательно, пробная частица может разрушиться, если приливные силы будут слишком велики. Сама величина приливных сил вблизи горловины (т.е. при $r \rightarrow r_0$), зависит напрямую от параметра λ : при $\lambda = 2$ из уравнения (4) следует, что приливные силы конечны и равны $R_{0202}^{(S)} = -1/2r_0^2$, при $1/2 < \lambda < 2$ все компоненты приливных сил будут равны 0, как было и предположено в работе [1], а в остальных случаях λ приливные силы разрушат пробную частицу.

Исследование выполнено за счет гранта РБ НОЦ-ГМУ-2022 (приказ № 2987 от 29.11.2022).

Список публикаций:

[1] Lessa L. A., Oliveira R., Silva J. E. G., Almeida C. A. S. // *Annals of Physics*. 2021. Vol. 433. P. 168604.

[2] Horowitz G. T., Ross S. F. // *Physical Review D*. 1997. Vol. 56. P.2180.

Квазиклассический предел в модели изотропной Вселенной со скалярным полем в рамках различных подходов

Кислякова Дарья Павловна
Айяла Онья Роджер Иван
Шестакова Татьяна Павловна
Южный федеральный университет
Шестакова Татьяна Павловна, к.ф.-м.н.
dkislyakova@sfedu.ru

В работе рассматривается переход к квазиклассическому пределу в закрытой изотропной Вселенной со скалярным полем, разложенным по амплитудам. Целью работы является сравнение результатов, полученных в рамках трех подходов к квантованию гравитации. Два из них основаны на формализме геометродинамики Уилера – Де Вита. Третьим рассматривается формализм расширенного фазового пространства. Основным уравнением в рамках этого подхода является не уравнение Уилера – Де Вита, а временное уравнение Шредингера, в которое, наряду с физическими степенями свободы, входят калибровочные. Для перехода к квазиклассическому пределу используется приближение Борна-Оппенгеймера. В качестве параметра разложения используется коэффициент $M = c^3/16\pi G$. Уравнение в порядке разложения $O(M)$ во всех трех случаях сводится к временному уравнению Шредингера для полей материи. Интерес представляет уравнение, получающееся в $O(1/M)$ порядке разложения. В рамках всех рассмотренных подходов оно соответствует временному уравнению Шредингера для полей материи с квантовогравитационными поправками. Показывается, полученные поправки отличаются в различных подходах и зависят от дополнительных предположений. Также в докладе уделяется внимание вопросу унитарности этих поправок.

Исследование основного состояния и устойчивости решеток магнитных скирмионов в магнитоэлектрических бислоях

Самигуллина Анжела Ильгизовна
Уфимский университет науки и технологий
Шарафуллин Ильдус Фанисович, д.ф.-м.н.
angelasamig2002@gmail.com

Интерес к исследованию магнитоэлектрических бислоев связан с тем, что на интерфейсе таких структур, то есть на границе пленок с разным упорядочением может формироваться достаточно сильное магнитоэлектрическое взаимодействие, которое приводит к тому, что в определенных условиях могут возникать скирмионы и состояния, в которых формируются решетки скирмионов [1-4]. Скирмионы представляют собой топологически защищенные вихревые спиновые структуры, размерами от 10 до 100 нм, которые являются кандидатами на логические элементы в новых устройствах памяти и, в принципе, обладают широкой областью применения в спинтронике, помимо этого данные магнитные образования обладают рядом уникальных свойств [1]. Управление магнитными нанообъектами (доменными стенками, скирмионами и др.) осуществляется с помощью либо внешнего поля (которое невозможно локализовать до масштабов исследуемых систем) либо электрических спин-поляризованных токов, в данной работе предложен подход управления скирмионами с помощью магнитоэлектрического взаимодействия.

В данной работе рассматривается бислой, состоящий из фрустрированной магнитной пленки с треугольной решетки и ферроэлектрической пленки, межслойное взаимодействие выбирается в виде магнитоэлектрического взаимодействия (последнее слагаемое в гамильтониане), кроме этого спины в магнитной пленке моделируются гейзенберговским гамильтонианом (первое слагаемое), в присутствии взаимодействия Дзялошинского–Мория в плоскости фрустрированной магнитной пленки (третье слагаемое), гамильтониана взаимодействия поляризации соседних узлов в ферроэлектрической пленке (второе слагаемое) (1):

$$H_m = -\sum_{i,j} J_{ij}^m \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \sum_{i,j} J_{ij}^f \vec{P}_i \cdot \vec{P}_j - \sum_{i,j} \vec{D}_{i,j} \cdot [\vec{S}_i \times \vec{S}_j] - J^{mf} \sum_{i,j} \vec{S}_i \cdot \vec{P}_j \quad (1)$$

Расчет основного состояния позволяет сделать вывод о том, что фаза скирмионной решетки формируется при нулевых температурах в области значений параметров, указанных взаимодействий в диапазонах $D \in (0.5, 1)$, $J^{mf} \in (1.5, 3.5)$ при фиксированных $J_{ij}^m = -1$, $J_{ij}^f = 1$. Результаты расчетов приведены в безразмерных единицах для удобства (Рис. 1). Так энергия измеряется в единицах J^m , а температура в единицах J^{2m}/k_B . Поэтому расчеты могут быть адаптированы и использованы для материалов с различными J^m .

Например, если известно, что в бислое с определенным стехиометрическим составом скирмионные фазовые переходы происходят при $T_C^{exp} = 200 \text{ K}$, можно рассчитать эффективный обменный параметр J_{eff} (3), воспользовавшись, например, уравнением среднего поля (2):

$$T_C^{exp} = \frac{2}{3k_B} Z \cdot S \cdot (S + 1) J_{eff} \quad (2)$$

$$J_{eff} = 34.51 \times 10^{-23} \text{ Дж} = 47.63 \text{ К}. \quad (3)$$

Здесь принято, что $Z = 6$ (треугольная решетка), $S = 1$ (модуль вектора спина) и $k_B = 1.3807 \times 10^{-23} \text{ Дж/К}$. J_{eff} – некоторое соотношение между величинами J^m , J^f , D и J^{mf} .

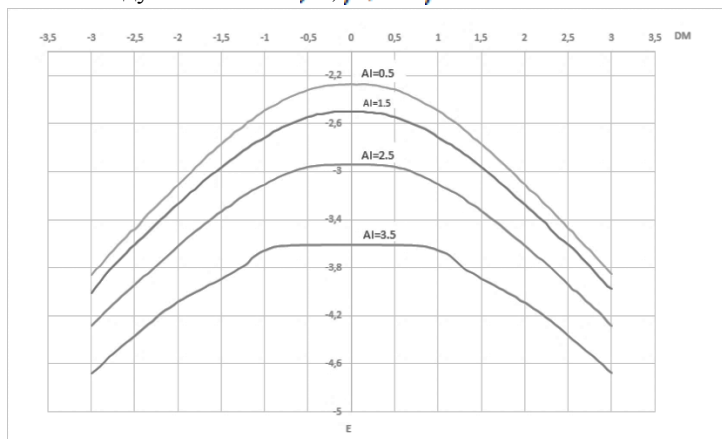


рис. 1 Полная энергия в зависимости от величины взаимодействия Дзялошинского – Мории для различных значений межслойного магнитоэлектрического взаимодействия в области существования фаз скирмионных решеток.

Фазовый переход, связанный с разрушением скирмионной решетки происходит в магнитной пленке при температуре ниже, чем фазовый переход порядок – беспорядок, также в работе получены значения температур переходов.

Список публикаций:

- [1] Samardak A.S., Kolesnikov A.G., Davydenko A.V. et al. // *Phys. Metals Metallogr.* 2022. V. 123. № 3. p. 227
- [2] Sharafullin, I.F., Diep, H. T. // *Symmetry.* 2020. V. 12. № 3. p. 26-41.
- [3] Sahbi El Hog, Sharafullin I.F., Diep H.T., Garbouj H., Debbichi M., Said M. // *Magnetism and Magnetic Materials.* 2022. V. 563. 169920.
- [4] Sharafullin I.F., Kharrasov M.K., Diep H.T. // *Phys. Rev.* 2019. V. 99. 214420.

Неэрмитовый гамильтониан Хатано-Нельсона

Тинюкова Татьяна Сергеевна

Чубурин Юрий Павлович

Удмуртский государственный университет,

Удмуртский федеральный исследовательский центр Уральского отделения РАН

ttinyukova@mail.ru

В настоящее время активно изучаются неэрмитовые дискретные структуры (см., например, [1], [2]). Нами рассмотрена неэрмитова модель Хатано-Нельсона [1].

В случае бесконечной цепочки неэрмитовый гамильтониан Хатано-Нельсона H действует на функции $\psi(n)$, определенные на узлах цепочки $n=0, \pm 1, \pm 2, \dots$, по формуле

$$(H\psi)(n) = (t-\gamma)\psi(n-1) + (t+\gamma)\psi(n+1),$$

где $t \pm \gamma$ – амплитуда перехода на соседний узел.

Потенциал V , действующий по формуле

$$(V\psi)(n) = -((t-\gamma)\psi(0)\delta_{n,1} + (t+\gamma)\psi(1)\delta_{n,0} + (t-\gamma)\psi(N)\delta_{n,N+1} + (t+\gamma)\psi(N+1)\delta_{n,N}),$$

уничтожает связи между узлами с номерами 0 и 1, а также с номерами N и $N+1$. Возмущенный гамильтониан вида $H+V$ позволяет рассмотреть конечную цепочку из N узлов с номерами $n=1, 2, \dots, N$.

Собственные значения и собственные функции гамильтониана $H+V$ находим с помощью уравнения Дайсона

$$\psi = -(H - E)^{-1}V\psi.$$

Теорема. При $t^2 > \gamma^2$ существует ровно N различных вещественных собственных значений гамильтониана $H+V$

$$E_m = 2\sqrt{t^2 - \gamma^2} \cos \frac{\pi m}{N+1}, \quad m=1, \dots, N,$$

при этом соответствующие собственные функции имеют вид

$$\psi_m(n) = \frac{(-1)^{m+1} \sin \frac{\pi m n}{N+1} (t + \gamma)^{\frac{N-n}{2}}}{2 \sin \frac{\pi m}{N+1} (t - \gamma)^{\frac{N-n}{2}}} \sin \frac{\pi n}{2}.$$

В случае полубесконечной цепочки с номерами узлов $n=1, 2, \dots$ в потенциале V оставляем лишь слагаемые, содержащие $\delta_{n,0}$ и $\delta_{n,1}$, так что потенциал разрывает связи лишь между узлами с номерами $n=0$ и $n=1$. В этом случае при $|t| \neq |\gamma|$ не существует ненулевых решений уравнения Дайсона.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания № 075-01483-23-00, проект FEWS-2020-0010

Список публикаций:

- [1] Okuma N. Sato M. *Non-Hermitian topological phenomena: A review* // *Annual Review of Condensed Matter Physics*. 2022. V. 14. P. 83-107.
- [2] Bergholtz E. J., Budich J. C., Kunst F. K. *Exceptional Topology of Non-Hermitian Systems* // *Rev. Mod. Phys.* 2021. V. 93. P. 015005.

2 - Физика конденсированного состояния вещества

Астафьев Павел Андреевич, аспирант 4 года обучения
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
Резонансные свойства антисегнетоэлектриков в СВЧ диапазоне
Резниченко Лариса Андреевна, д.ф.-м.н.
e-mail: l.b.e.g.w.4.a.g.p@yandex.ru стр. 34

Баранов Даниил Константинович, аспирант 1 года обучения
Екатеринбург, Институт электрофизики УрО РАН, лаб. теоретической физики
Теоретическое исследование электрофизических свойств магнитных нанокompозитов металл-диэлектрик на основе Ni и Fe.
Некрасов Игорь Александрович, д.ф.-м.н.
e-mail: tony.baranov@mail.ru стр. 35

Глухов Кирилл Ильич, 4 курс
Екатеринбург, Уральский федеральный университет, институт естественных наук и математики
Структура и динамика решетки $Gd_2Sn_2O_7$ и $Y_2Sn_2O_7$: ab initio расчет
Чернышев Владимир Артурович, к.ф.-м.н.
e-mail: glukhovk172@yandex.ru стр. 36

Гусейнов Тимур Забитович, 4 курс
Ижевск, Удмуртский государственный университет, институт математики, информ-х технологий и физики
Определение скорости распыления тонких пленок Co и Cr методом послойного профилирования
Бакиева Ольга Ринатовна, к.ф.-м.н.
e-mail: ftiran@mail.ru стр. 37

Дорофеева Вера Вячеславовна, 4 курс
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
Локальные состояния и температуры магнитных фазовых переходов в $PbFe_{0.5}Nb_{0.5}O_3$, $BiFe_{0.5}Sc_{0.5}O_3$ и $BiFe_{0.5}Cr_{0.5}O_3$
Кубрин Станислав Петрович, к.ф.-м.н.
e-mail: dorofeeva.v.501@gmail.com стр. 38

Жидель Карина Михайловна, аспирант 4 года обучения
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
Влияние GeO_2 на электрофизические параметры твердых растворов на основе BFO и PFN
Павленко Анатолий Владимирович, д.ф.-м.н.
e-mail: karinagidele@gmail.com стр. 39

Константинова Елизавета Ивановна, ст. преподаватель
Калининград, Калининградский государственный технический университет, Институт цифровых технологий
Исследование диэлектрических и оптических свойств шероховатых пленок серебра в поверхностно-усиленном комбинационном рассеянии
e-mail: konstantinovaeliz@gmail.com стр. 40

Коренистов Павел Сергеевич, аспирант
Екатеринбург, Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН
Структура, электрические и магнитные свойства интерметаллических соединений марганца Mn_3X ($X = Al, Ga, Ge$) после различных обработок
Марченков Вячеслав Викторович, д.ф.-м.н.
e-mail: korenistov@imp.uran.ru стр. 42

Коренистов Павел Сергеевич, аспирант
Екатеринбург, Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, лаб. низких температур
Об экспериментальной реализации теоретически предсказанных новых сплавов Гейслера. Спиновый бесщелевой полупроводник $FeCrTiAl$
Марченков Вячеслав Викторович, д.ф.-м.н.
e-mail: korenistov@imp.uran.ru стр. 41

Кочкин Андрей Сергеевич, аспирант 1 года обучения
Барнаул, Алтайский государственный технический университет, специальных технологий
Исследование локальных тензоров сольватированного 5-мерного пептида
Старостенков Михаил Дмитриевич, д.ф.-м.н.
e-mail: andre211@mail.ru стр. 42

Кузнецова Александра Юрьевна, инженер-исследователь
Екатеринбург, Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, лаб.электрических явлений
Изучение и сравнение электронных структур интеркалатных систем FexTiSe_2 и TixTiSe_2
e-mail: kau@imp.uran.ru стр. 43

Макаренко Андрей Александрович, магистрант 1 года обучения
Ростов-на-Дону, НИИ физики Южного федерального университета
Уточнение стехиометрии титаната- ниобата стронция методом Ритвельда
Куприна Юлия Александровна, к.ф.-м.н.
e-mail: amakaren@sfedu.ru стр. 45

Меренцов Александр Ильич, с.н.с.
Екатеринбург, Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, лаб. электрических явлений
Метод сканирующей рентгеновской фотоэлектронной микроскопии (SPEM) и его реализация в синхротронных центрах
e-mail: Alexander.Merentsov@urfu.ru стр. 46

Меренцова Кристина Александровна, аспирант 2 года обучения, инженер исследователь
Екатеринбург, Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, отдел наноспинтроники
Зависимость фазового состава тонких плёнок $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ от температуры термообработки
Носов Александр Павлович, д.ф.-м.н.
e-mail: merencovak@imp.uran.ru стр. 46

Недоедкова Ольга Вадимовна, аспирант 1 года обучения
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
Исследование особенностей атомной и электронной структуры нанокompозитов ПАНИ/Ме: методы рентгеновской и оптической спектроскопии поглощения
Яловега Галина Эдуардовна, д.ф.-м.н.
e-mail: nedoedkova@sfedu.ru стр. 47

Нечитайлова Ирина Олеговна, 4 курс
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
Влияние механоактивации на сегнетоэлектрические материалы со структурой перовскита по данным рентгеновской спектроскопии XANES
Сухарина Галина Борисовна, к.ф.-м.н.
e-mail: inec@sfedu.ru стр. 48

Огнев Сергей Олегович, 2 курс
Томск, Томский политехнический университет, Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, отделение экспериментальной физики
Особенности фазовых превращений в сплавах титана с ванадием и молибденом: расчеты из первых принципов
Святкин Леонид Александрович, к.ф.-м.н.
e-mail: soo1@tpu.ru стр. 49

Перевалова Александра Николаевна, м.н.с.
Екатеринбург, Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, -
Особенности структуры, электро- и магнитосопротивления монокристалла MnBi_2Te_4
Марченков Вячеслав Викторович, д.ф.-м.н.
e-mail: domozhirova@imp.uran.ru стр. 51

Поносова Екатерина Евгеньевна, 3 курс
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
Структура активных центров медьсодержащих цеолитов: спектроскопия рентгеновского поглощения и компьютерное моделирование
Сухарина Галина Борисовна, к.ф.-м.н.
e-mail: ponosova02@bk.ru стр. 52

Терентьева Дарья Витальевна, 2 курс
Томск, Томский политехнический университет, инженерная школа ядерных технологий
Электронная структура поверхностного сплава Ag₂Bi на поверхностях (111) и (423) серебра
Святкин Леонид Александрович, к.ф.-м.н.
e-mail: dvt17@tpu.ru стр. 52

Тимофеев Вячеслав Сергеевич, аспирант 1 года обучения
Кемерово, Кемеровский государственный университет, институт фундаментальных наук
Электронное строение кристаллов Mg₂NA (A = F, Cl) с решеткой антихалькопирита
Гордиенко Алексей Болеславович, д.ф.-м.н.
e-mail: slava.timofeev.mail@gmail.com стр. 54

Трифонов Иван Олегович, 5 курс
Первоуральск, Уральский федеральный университет, физико-технологический институт
Влияние корреляционных эффектов на электронную структуру и магнитные свойства CuCO₂S₄: расчеты в рамках DFT+DMFT
Скорняков Сергей Львович, д.ф.-м.н.
e-mail: probrakeup@gmail.com стр. 55

Уткин Максим Алексеевич, аспирант 2 года обучения
Пермь, Пермский государственный национальный исследовательский университет, физический
Исследование дефектов в цилиндрической капле нематического жидкого кристалла
Макаров Дмитрий Владимирович, к.ф.-м.н.
e-mail: utkinmaksim@gmail.com стр. 57

Фоминых Богдан Михайлович, 5 курс
Екатеринбург, Уральский федеральный университет, физико-технологический институт
Электронные транспортные свойства топологического полуметалла PtSn₄
Марченков Вячеслав Викторович, д.ф.-м.н.
e-mail: fominvykh@imp.uran.ru стр. 58

Чернов Евгений Денисович, м.н.с.
Екатеринбург, Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН
Электронная структура и магнитные свойства MnTe
Лукоянов Алексей Владимирович, к.ф.-м.н.
e-mail: chernov_ed@imp.uran.ru стр. 59

Шашков Денис Игоревич, преподаватель
Краснодар, Кубанский государственный университет, физико-технический
Влияние циклической заморозки на динамику нанокластеров серебра на поверхности полипропиленовых и полиэфирных волокон
e-mail: ShiniX88@mail.ru стр. 60

Шкварин Алексей Сергеевич, с.н.с.
Екатеринбург, Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, лаб. рентгеновской спектроскопии
Кристаллическая и электронная структура Cu_{0,5}ZrSe₂
e-mail: shhkvarin@imp.uran.ru стр. 61

Юлдашева Алина Рифовна, ассистент
Уфа, Уфимский университет науки и технологий, физико-технический институт
Устойчивость скирмионов в фрустрированных антиферромагнитных/сегнетоэлектрических бислоях с треугольной решеткой
e-mail: alina.yuldasheva.92@mail.ru стр. 62

Резонансные свойства антисегнетоэлектриков в СВЧ диапазоне

Астафьев Павел Андреевич

Иванов Иван Александрович, Борзых Александр Романович

Южный федеральный университет

Резниченко Лариса Андреевна, д.ф.-м.н.

l.b.e.9.w.4.a.9.p@yandex.ru

Сегнетоэлектрические материалы нашли широкое применение в СВЧ технике в качестве материалов СВЧ резонаторов, фильтров, фазовращателей. Наиболее подходящим для данных приложений материалом считается титанат бария стронция благодаря низкими потерями в СВЧ диапазоне. Все же, до сих пор предпринимаются попытки улучшить свойства базовой системы, например, при помощи модификации ее структуры или усложнения элементного состава и создания композитов. В рамках подхода усложнения элементного состава, двухкомпонентные и многокомпонентные твердые растворы на основе PbTiO_3 (PT) и PbZrO_3 (PZ) также могут быть использованы в различных радиоэлектронных компонентах. Однако, в настоящее время не так много внимания уделяется электродинамическим свойствам данных материалов в областях концентрационных и температурных фазовых переходов. Между тем, наш предыдущий опыт измерения сегнетоэлектрических, антисегнетоэлектрических материалов, а также сегнетоэлектриков-релаксоров показал наличие резонансного поведения образцов различной формы и размера в электромагнитных полях СВЧ диапазона различных конфигураций. Рассматривались как двухкомпонентные, так и многокомпонентные твердые растворы на основе $(x-1)\text{PbZrO}_3$ - $x\text{PbTiO}_3$ (PZT) в области концентрационных и температурных фазовых переходов, при этом высокочастотные резонансы были обнаружены только в антисегнетоэлектрической фазе. Система $(x-1)\text{NaNbO}_3$ - $x\text{KNbO}_3$ (NKN) имеет схожую фазовую x -T диаграмму, поэтому, для подтверждения ранее полученных результатов требуется провести исследование иных составов, а также дополнительное исследование системы PZT с использованием иных методик измерения.

Таким образом, целью настоящей работы был поиск резонанса электромагнитных волн в образцах двухкомпонентных твердых растворов сегнето-антисегнетоэлектриков в СВЧ диапазоне.

Для проведения данного исследования был выбран ряд составов системы PZT в окрестностях концентрационного сегнетоэлектрического-антисегнетоэлектрического фазового перехода (молярная доля PbTiO_3 – 0...5 %), а также ряд составов системы NKN в антисегнетоэлектрическом состоянии (молярная доля KNbO_3 – 0...4 %). Образцы были выполнены в виде цилиндров высотой 1 мм и диаметром 12 мм с погрешностью по высоте не более 5%. Исследования проводились с использованием векторного анализатора цепей P9375A "Keysight" и нескольких измерительных ячеек. Прямая микрополосковая линия (МПЛ) с коаксиальными разъемами, имеющими предел по частоте 18 ГГц, использовалась для измерения коэффициента поглощения образцов материала, при этом образцы помещались в центр МПЛ на фиксированную позицию. Плата с двумя параллельными МПЛ использовалась для обнаружения резонансов, образцы помещались между МПЛ.

Результаты измерения и расчетов показывают, что по мере приближения к морфотропной области, у образцов состава PZT наблюдается снижение интенсивности и добротности резонансных максимумов поглощения, при этом в морфотропной области наблюдается резкое увеличение уровня поглощения в диапазоне частот 3-8 ГГц, не связанное с резонансом (рис. 1).

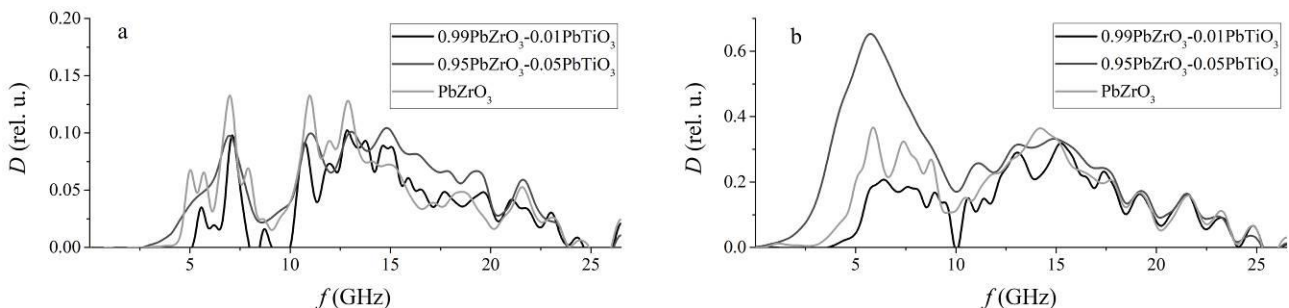


рис.1. Зависимости коэффициента поглощения от частоты образцов PZT измеренных в ячейке с двумя параллельными МПЛ (а) и в ячейке с прямой МПЛ (б).

В образцах состава NKN также наблюдается увеличение интенсивности и ширины максимумов поглощения, не связанное с резонансом (рис. 2 б). Об этом свидетельствует отсутствие существенных изменений в интенсивности и добротности резонансных максимумов (рис. 2 а).

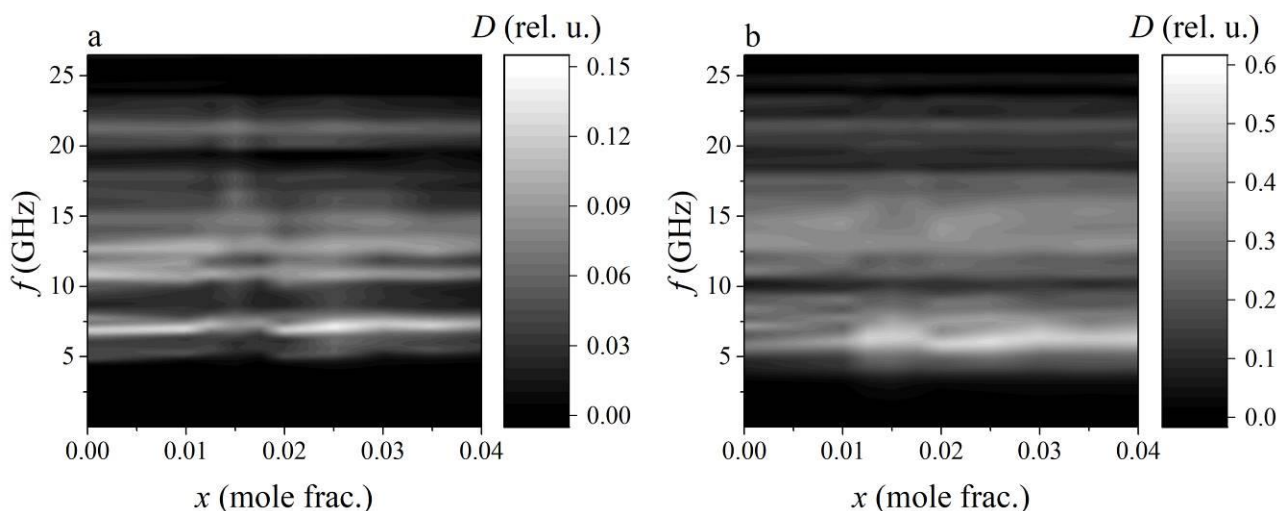


рис.2. Зависимости коэффициента поглощения от частоты и концентрации KNbO_3 образцов NKN измеренных в ячейке с двумя параллельными МПП (а) и в ячейке с прямой МПП (б).

Результаты исследования показали, что по мере приближения к морфотропной области увеличивается уровень и ширина полосы СВЧ поглощения как в системе PZT, так и в системе NKN. В обеих системах наблюдается резонансное поведение в антисегнетоэлектрической области, которое существует независимо от уровня поглощения.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности 2023 г.). Проект № FENW-2023-0010/(ГЗ0110/23-11-ИФ).

Название исследование электрофизических свойств магнитных нанокompозитов металл-диэлектрик на основе Ni и Fe

Баранов Даниил Константинович

Некрасов Игорь Александрович, Бекетов Игорь Валентинович, Багазеев Алексей Викторович, Малкин Александр Иванович, Князев Николай Сергеевич, Апресян Леон Арсенович

Институт электрофизики УрО РАН

Некрасов Игорь Александрович, д.ф.-м.н.

tony.baranov@mail.ru

Одним из направлений изучения физических свойств наночастиц является исследование их взаимодействия с электромагнитным излучением: исследование прохождения, отражения и поглощения электромагнитной волны композитным материалом с наночастицами в зависимости от их размера, формы и т.д. Основными величинами, которые характеризуют электрофизические свойства таких композитов, являются комплексные диэлектрическая и магнитная проницаемости.

В данной работе будет представлено экспериментальное и теоретическое исследование электрофизических свойств магнитных композитов на основе Fe и Ni с массовой долей наночастиц 10%, 20% и 40% при различных толщинах образцов в частотном диапазоне 8-23 ГГц. Для создания данных исследуемых композитов используется нанопорошок с диаметром частиц 75 нм, который получают методом электрического взрыва проволоки [1]. После чего этот нанопорошок размещан в эпоксидной смоле с ее дальнейшим затвердеванием. Для изучения роли агломераций также были выполнены композиты на основе карбонильного железа, частицы которого намного крупнее частиц нанопорошка, и проведено измерение их свойств в том же частотном диапазоне.

Комплексные величины коэффициентов отражения от границы образца конечной толщины для случая прямоугольного волновода получены методом линии передачи с использованием векторного анализатора цепей [2]. На основе полученных экспериментальных данных вычислены диэлектрическая и магнитная проницаемости исследуемых нанокompозитов с использованием математического аппарата метода NRW (Nicolson–Ross–Weir) [3].

Теоретический расчет эффективной диэлектрической проницаемости магнитных нанокompозитов в данной работе был проведен в рамках метода Бруггемана с учетом агломерации наночастиц [4]:

$$\varepsilon'_{obl/pr} = \varepsilon_1 \frac{1 + \frac{1}{2}(\beta_{obl/pr} - 3)f_2}{1 - \beta_{obl/pr}f_2} \quad (1)$$

где β - параметр анизотропии; ε_2 - диэлектрическая проницаемость металла; f_1 - объемная доля эпоксидной смолы; f_2 - объемная доля наночастиц; ε'_{obl} - эффективная диэлектрическая проницаемость нанокompозита со сплюснутыми агломератами; ε'_{pr} - эффективная диэлектрическая проницаемость нанокompозита с вытянутыми агломератами. Далее были вычислены коэффициенты отражения для случая падения электромагнитной волны в прямоугольном волноводе на границу слоя конечной толщины [5].

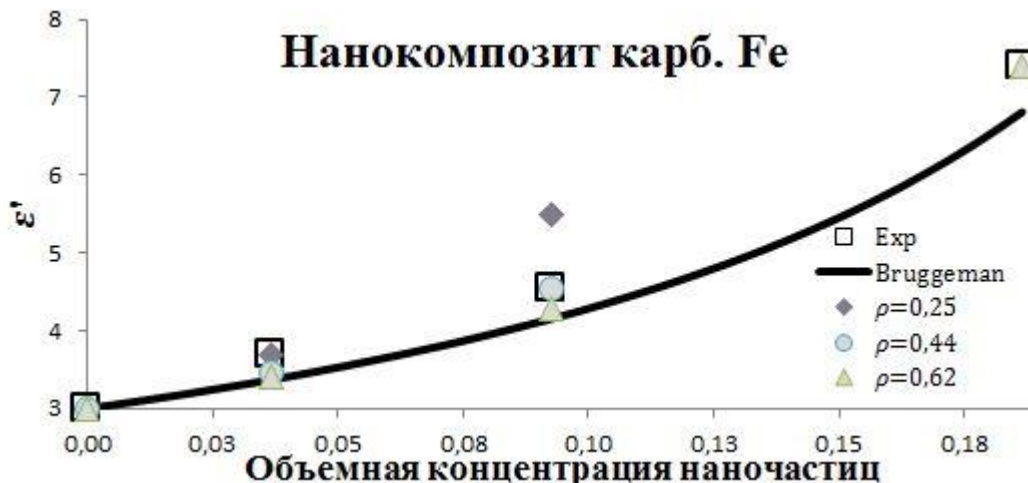


рис.1. Зависимость действительной части эффективной диэлектрической проницаемости от объемной концентрации наночастиц в композите с учетом агломерации наночастиц

На рис.1 представлена зависимость действительной части эффективной диэлектрической проницаемости от объемной концентрации наночастиц в композите с учетом агломерации наночастиц. Квадратный маркер соответствует экспериментальным данным, сплошная линия соответствует данным полученным в рамках метода Бруггемана, остальные маркеры соответствуют данным полученным с помощью формулы (1) с учетом агломерации наночастиц. Параметр ρ отображает отношение полуосей сфероидальных агломератов наночастиц.

Список публикаций:

- [1] Котов Ю. А. // Нанотехнологии в России. 2009. V. 4. P. 415.
- [2] Малкин А. И., Князев Н. С. // CEUR Workshop Proceedings. 2017. T. 1814. C. 45.
- [3] De Paula A.L., Rezende M.C., Barroso J.J. // SBMO/IEEE MTT-S Int. Microw. Optoelectron. Conf. 2011. P. 488.
- [4] D.A.G. Bruggeman // Ann. Phys. 1935. V. 416. P. 636.
- [5] Q. Chen et al. // AIP Advances. 2019. V. 9. P. 015113.

Структура и динамика решетки $Gd_2Sn_2O_7$ и $Y_2Sn_2O_7$: ab initio расчет

Глухов Кирилл Ильич

Чернышев Владимир Артурович

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина

Чернышев Владимир Артурович, к.ф.-м.н.

glukhovk172@yandex.ru

Кристаллы со структурой пироклора $R_2B_2O_7$ (R – редкоземельный ион, B – Ti, Ge, Zr, Sn), привлекают внимание благодаря потенциальному применению в качестве люминофоров. Станнат иттрия $Y_2Sn_2O_7$ и станнаты с подрешеткой редкоземельных ионов также активируют другими редкоземельными ионами [1]. Представляет интерес исследование фононного спектра и упругих свойств редкоземельных станнатов. В работе проведен ab initio расчет фононного спектра $Gd_2Sn_2O_7$ и $Y_2Sn_2O_7$, определены частоты и типы ИК и КР мод. Рассчитаны упругие постоянные и твердость по Виккерсу всего ряда редкоземельных станнатов. Показано, что расхождение результатов расчета с экспериментом менее 10%, исходя из экспериментальных данных, имеющихся для некоторых представителей ряда.

Исследовано влияние гидростатического сжатия на фононный спектр станнатов гадолиния и иттрия. Расчеты проведены в рамках DFT с гибридными функционалами, учитывающими вклад нелокального обмена в формализме Хартри-Фока. Показана возможность использовать псевдопотенциал для описания внутренних оболочек редкоземельного иона при расчете фононного спектра и упругих свойств редкоземельных станнатов.

Использована программа CRYSTAL [2]. Из анализа векторов смещений, полученных из *ab initio* расчета, определена степень участия ионов в каждой моде.

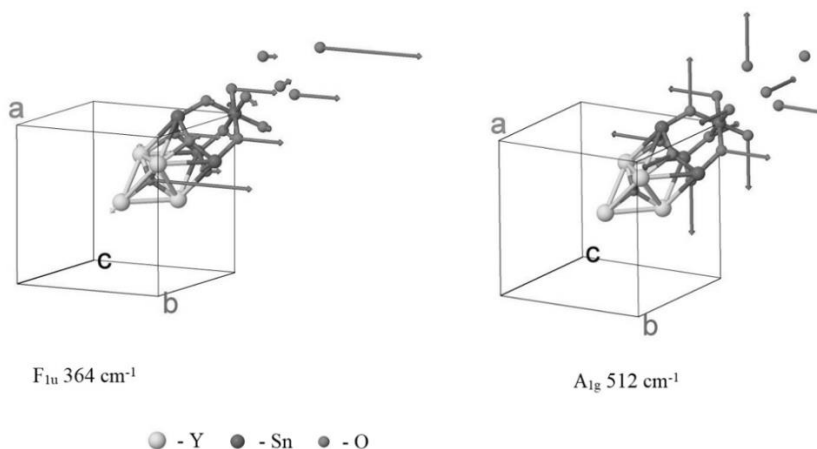


рис.1. Наиболее интенсивные ИК и КР моды в $Y_2Sn_2O_7$

Определены наиболее интенсивные ИК и КР моды станната иттрия (рис.1) и станната гадолиния. В моде F_{1u} участвуют преимущественно ионы кислорода, а в моде A_{1g} – только ионы кислорода в позиции 48f.

Определены моды с абсолютным или преимущественным участием кислорода в позиции 48f, характеризуемой координатой x . Показано, что в самой интенсивной КР-моды участвуют преимущественно ионы кислорода, находящиеся в позиции 48f.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ (проект № FEUZ-2023-0017)

Список публикаций:

[1] Cao R., Quan G., Shi Z., Chen T., Luo Z., Zheng G., Hu, Z. // *J. Phys. Chem. Solids*. 2018. V. 118. P. 109.

[2] <https://www.crystal.unito.it/index.php>

Определение скорости распыления тонких пленок Co и Cr методом послойного профилирования

Гусейнов Тимур Забитович

Валеев Ришат Галеевич, Бельтюков Артемий Николаевич, Бакиева Ольга Ринатовна

Удмуртский государственный университет

Бакиева Ольга Ринатовна, к.ф.-м.н.

ftiran@mail.ru

Исследования современных материалов требуют соответствующего инструментария и методов анализа. Наноразмерные пленки, слоистые и 2D системы обладают уникальными функциональными свойствами, которые зависят как от элементного состава, так и от размерности слоя. Так, система тонких пленок Co/Cr является перспективной для изготовления жестких магнитных дисков с высокой плотностью записи информации. При этом существенную роль играет как толщина пленок, так и их химическая чистота, поскольку эти параметры влияют на величину коэрцитивной силы [1, 2]. Для контроля химического и элементного состава слоев обычно используются методы электронной и рентгено-электронной спектроскопии. Послойное травление поверхности пленки ионами инертного газа и параллельно с этим получение спектральных данных позволяет определить профиль распределения химических элементов по глубине пленки. Однако существует проблема корректного определения скорости травли материала, поскольку имеющиеся на данный момент справочники содержат информацию для объемных веществ, а не наноразмерных пленок. Так, например для того, чтобы узнать на какой глубине находятся дефекты или неоднородности в элементном составе критически важно знать, сколько нм материала стравливается в одном цикле профилирования.

В настоящей работе проведено исследование серии многослойных наноразмерных ферромагнитных систем C/Co/Cr, C/Co, C/Cr нанесенных методом магнетронного напыления (установка ВУП-5) на монокристаллический кремний. Слой углерода толщиной не более 5 нм был нанесен на поверхность металлических пленок в качестве запирающего, для предотвращения окисления металла на воздухе. Проведена

аттестация химической чистоты синтезированных пленок. Исследование элементного состава поверхности проведено методом оже-электронной спектроскопии с помощью оже-микроанализатора Jamp 10S (Jeol). Изменение концентрации химических элементов по глубине образца исследовано с помощью профилирования потоком ионов аргона при ускоряющем напряжении 1 и 3 кэВ. Профилирование состояло из нескольких циклов травления ионами аргона. Один цикл – это травление ионами аргона в течение 1 минуты, с последующим получением оже электронного спектра. Показано, что вблизи слоя углерода и подложки кремния металлические пленки содержат кислород, то есть возможно образование оксидов как хрома, так и кобальта. С помощью метода атомно-силовой микроскопии была определена глубина профилирования многослойных систем. Полученные результаты позволили определить средние скорости травления каждого слоя, что является важной информацией необходимой для корректной аттестации систем на основе пленок Co/Cr.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ №121030100002-0. Исследования выполняли с использованием оборудования ЦКП «Центр физических и физико-химических методов анализа, исследования свойств и характеристик поверхности, наноструктур, материалов и изделий» УдмФИЦ УрО РАН.

Список публикаций:

[1] С.П. Малюков, С.С. Зиновьев, А.В. Саенко, Ю.В. Клунникова, Д.В. Тимощенко // *Известия ЮФУ. Технические науки*. 2019. №6(208.) С. 25.

[2] S. Somboonsap, W. Rattanasakulthong // *Functional Materials Letters*. 2021. Vol. 14. №1. P. 2151010.

Локальные состояния и температуры магнитных фазовых переходов в $\text{PbFe}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}\text{O}_3$, $\text{BiFe}_{0.5}\text{Sc}_{0.5}\text{O}_3$ и $\text{BiFe}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{O}_3$

Дорофеева Вера Вячеславовна
Пикуль Анастасия Денисовна
Южный федеральный университет
Кубрин Станислав Петрович
dorofeeva.v.501@gmail.com

Одной из проблем при создании материалов мультиферроиков является возможность управления температурами возникновения магнитных и сегнетоэлектрических переходов. В случае мультиферроиков с разбавленной магнитной подрешёткой особую роль играет локальная структура соединений. В работе проведено исследование образцов керамики $\text{PbFe}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}\text{O}_3$, $\text{BiFe}_{0.5}\text{Sc}_{0.5}\text{O}_3$ и $\text{BiFe}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{O}_3$, приготовленных твердофазным синтезом. Образцы $\text{BiFe}_{0.5}\text{Sc}_{0.5}\text{O}_3$ и $\text{BiFe}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{O}_3$ синтезировались под давлением в 4.5 ГПа. Рентгендифракционное исследование показало, что образцы однофазны и обладают структурой перовскита.

При комнатной температуре, мессбауэровские спектры образцов представляют собой парамагнитные дублеты с параметрами, характерными для ионов Fe^{3+} в октаэдрическом окружении. На рис. 1 представлены зависимости интенсивности парамагнитных линий мессбауэровских спектров $\text{PbFe}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}\text{O}_3$, $\text{BiFe}_{0.5}\text{Sc}_{0.5}\text{O}_3$ и $\text{BiFe}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{O}_3$. Середины спадов данных зависимостей соответствуют температурам магнитных фазовых переходов (T_N) в данных образцах. Установлено, что в $\text{PbFe}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}\text{O}_3$ T_N составляет 150К, а в $\text{BiFe}_{0.5}\text{Sc}_{0.5}\text{O}_3$ и $\text{BiFe}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{O}_3$ – 200 и 250К соответственно. Поскольку параметры кристаллических ячеек и микроструктура исследуемых керамик не имеет значимых отличий, то причина в различии T_N вероятно связана с распределением катионов в В-подрешётке. Для проверки этого предположения было проведено исследование локальной структуры исследуемых образцов методами мессбауэровской спектроскопии.

На рис. 2 представлены мессбауэровские спектры образцов $\text{PbFe}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}\text{O}_3$, $\text{BiFe}_{0.5}\text{Sc}_{0.5}\text{O}_3$, $\text{BiFe}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{O}_3$, измеренные при 14К. Спектры разложены на несколько секстетов. Каждый секстет соответствует локальному состоянию ионов Fe^{3+} с различным числом ионов $\text{Nb}^{5+}/\text{Cr}^{3+}/\text{Sc}^{3+}$ в качестве ближайшего соседа. Расчет числа локальных состояний с помощью биномиального распределения показал, что всего существуют 6 состояний ионов Fe^{3+} , а распределение вероятностей данных состояний имеет симметричный характер. Значения площадей секстетов примерно равны концентрации ионов Fe^{3+} в соответствующих локальных состояниях. Во всех исследуемых образцах наблюдается отклонение распределения В-катионов от теоретического. Наиболее сильное отклонение наблюдается для $\text{BiFe}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{O}_3$. В данном соединении происходит сегрегирование ионов Fe^{3+} и Cr^{3+} , что, кроме того, препятствует формированию цепей обмена $\text{Fe}^{3+} - \text{O}^{2-} - \text{Cr}^{3+}$. В железосодержащих оксидах со структурой перовскита T_N определяется числом цепей обмена $\text{Fe}^{3+} - \text{O}^{2-} - \text{Fe}^{3+}$. Чем больше таких цепей, тем выше значение T_N . Возникающая неоднородность распределения катионов В-подрешетки приводит к возрастанию концентрации цепей магнитного обмена. Наибольшая концентрация таких цепей возникает в $\text{BiFe}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{O}_3$ в результате формирования кластеров с низким содержанием ионов Cr^{3+} .

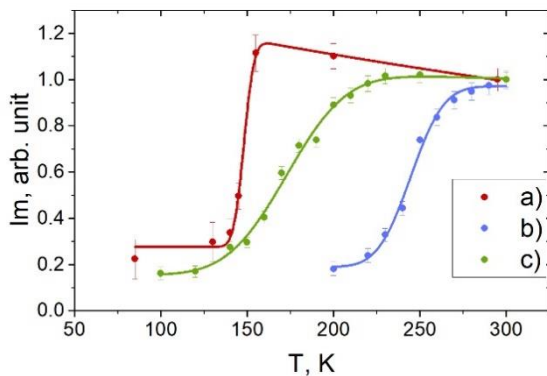


рис. 1. Температурные зависимости интенсивности парамагнитных линий мессбауэровских спектров образцов а) $PbFe_{0.5}Nb_{0.5}O_3$, б) $BiFe_{0.5}Sc_{0.5}O_3$, в) $BiFe_{0.5}Cr_{0.5}O_3$ приведенных к их значениям при 300K

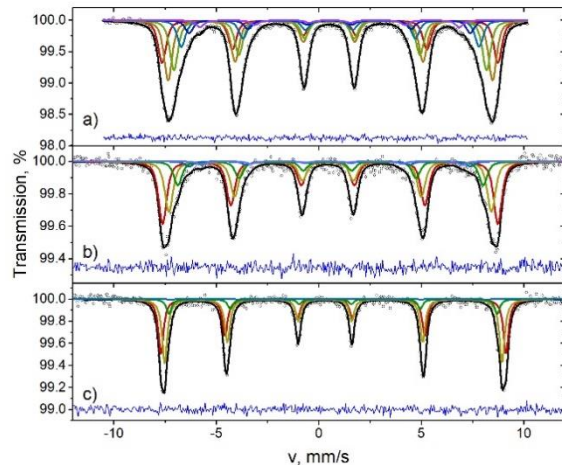


рис. 2. Мессбауэровские спектры образцов керамик а) $PbFe_{0.5}Nb_{0.5}O_3$, б) $BiFe_{0.5}Sc_{0.5}O_3$, в) $BiFe_{0.5}Cr_{0.5}O_3$ измеренные при 14K

Таким образом, в $PbFe_{0.5}Nb_{0.5}O_3$, $BiFe_{0.5}Sc_{0.5}O_3$, $BiFe_{0.5}Cr_{0.5}O_3$ значение T_N в сильно зависит от локальной структуры. В частности, распределение катионов В-подрешетки определяет число цепочек магнитного взаимодействия между ионами Fe^{3+} .

Влияние GeO_2 на электрофизические параметры твердых растворов на основе BFO и PFN

Жидель Карина Михайловна

Резниченко Лариса Андреевна

Южный федеральный университет

Павленко Анатолий Владимирович, д.ф.-м.н.

karinagidele@gmail.com

Мультиферроики, представляющие собой обширный класс материалов, сочетающих в себе сегнетоэлектрические, ферромагнитные и сегнетоэластические свойства, в настоящее время подробно изучаются в связи с потенциальной возможностью их применения в новых устройствах, основанных на взаимном контроле магнитного и электрического полей [1, 2]. Одними из наиболее изучаемых мультиферроиков являются $BiFeO_3$ (BFO), который обладает высокими значениями температур антиферромагнитного (АФМ) ($T_N = 653$ K) и сегнетоэлектрического (СЭ) переходов ($T_C = 1103$ K), и является наиболее популярным компонентом для конструирования мультиферроидных систем [3], а также $PbFe_{0.5}Nb_{0.5}O_3$ (PFN), в котором размытый фазовый переход из параэлектрической в СЭ фазу происходит при $T_C = 370$ K [4]. Несмотря на то, что СЭ- и АФМ-упорядочения в PFN сосуществуют только ниже $T_N = (120 \div 150)$ K [4], слабые магнитоэлектрический и магнитодиэлектрический эффекты в нем могут проявляться и при температурах выше комнатной [5]. Однако широкое использование BFO и PFN ограничено рядом факторов. Так, высокие значения токов утечки, из-за повышенной электрической проводимости твердых растворов (ТР), обусловленной наличием кислородных вакансий, а также примесных фаз, накладывают ограничения на их использование. Решение этой проблемы возможно, в том числе, за счет создания многокомпонентных материалов на основе BFO и PFN со стабилизированной структурой и улучшенными свойствами. При этом одним из путей улучшения технологичности объектов и стабилизации макросвойств является их модификация различными элементами, в частности, приводящая к снижению температуры синтеза и спекания ТР.

В представленной работе описаны результаты исследования влияния модификатора диоксида германия GeO_2 на электрофизические параметры ТР бинарных систем на основе феррита висмута и феррониобата свинца состава $(1-x)BiFeO_3-xPbFe_{0.5}Nb_{0.5}O_3$ с $x = 0.3, 0.95$, модифицированных сверхстехиометрически в количествах $(0.5 \div 1.0)$ масс. %. Образцы получены методом твердофазных реакций с последующим спеканием по обычной керамической технологии. Измерительные образцы изготавливали в виде дисков (диаметр 10 мм, толщина 1 мм). Плоские поверхности обрабатывали алмазным инструментом по 6 классу точности. Металлизацию осуществляли двукратным вжиганием серебряносодержащей пасты при температуре $700^\circ C$ в течение 0.5 часа. Измерения относительной комплексной диэлектрической проницаемости $\epsilon^*/\epsilon_0 = \epsilon'/\epsilon_0 - i\epsilon''/\epsilon_0$ (ϵ' и ϵ'' –

действительная и мнимая части ε^* соответственно, ε_0 – диэлектрическая постоянная) производили в диапазоне частот $f = 20\text{--}2 \cdot 10^6$ Hz в интервале температур 20–650 °C на автоматическом измерительном стенде на базе LCR-метра Agilent E4980A и терморегулятора Варта ТП703 соответственно. P – E -петли диэлектрического гистерезиса исследовались с использованием схемы Сойера–Тауэра при частоте электрического поля $f = 50$ Гц и комнатной температуре. Формирование поляризованного состояния осуществляли методом «горячей» поляризации, при которой электрическое поле к образцам прикладывали при высокой температуре. Исследования пьезоэлектрических и упругих параметров ТР при комнатной температуре проводили методом резонанса—антирезонанса с помощью прецизионного LCR-метра Agilent 4980A. Показано, что введение модификатора привело к изменению характера диэлектрических, сегнетоэлектрических и пьезоэлектрических зависимостей по сравнению с «чистыми» составами ТР данных систем. Предложено объяснение наблюдаемым эффектам.

Использовано оборудование Центра коллективного пользования НИИ физики Южного федерального университета «Электромагнитные, электромеханические и тепловые свойства твердых тел».

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности 2023 г.). Проект № FENW-2023-0010/(ГЗ0110/23-11-ИФ).

Список публикаций:

- [1] Spaldin N.A., Ramesh R. // *Nature materials*. 2019. V. 18. No. 3. P. 203-212.
- [2] Kleemann W. et al. // *IEEE transactions on ultrasonics, ferroelectrics, and frequency control*. 2010. V. 57. No. 10. P. 2228-2232.
- [3] Yuan G.L. et al. // *Solid State Communications*. 2006. V. 138. No. 2. P. 76-81.
- [4] Венецов Ю.Н., Гагулин В.В., Любимов В.Н. *Сегнетомагнетики*. М.: Наука, 1982. 224 с.
- [5] Турик А.В. и др. // *Физика твердого тела*. 2012. Т. 54. No. 5. С. 891-893.

Исследование диэлектрических и оптических свойств шероховатых пленок серебра в поверхностно-усиленном комбинационном рассеянии

Константинова Елизавета Ивановна

А.В. Цибульникова, А.Ю. Зюбин, В.А. Слежкин, В.В. Брюханов, И.Г. Самусев, П.Н. Медведская, И.И. Лягун

Калининградский государственный технический университет

konstantinovaeliz@gmail.com

Явление оптической генерации поверхностных плазмонов в наночастицах благородных металлов широко используется в производстве сенсоров, в создании наноантенн, спазеров и других оптоэлектронных устройств и преобразователей. Индуцированная плазмонным резонансом высокая локализация электромагнитных полей вблизи металлических наночастиц (НЧ) и наноконструкций, формирующих шероховатую микро- и наноповерхность, проявляется в изменении модового состава электронных колебаний, что влияет на эффективность передачи электронной энергии на молекулярные системы. Таким образом, исследования процессов генерации плазмонов на микро- и наношероховатых поверхностях имеют практический интерес для разработки сенсоров.

В данной работе методами электронной, атомно-силовой микроскопии и рамановской спектроскопии (FIB-SEM Zeiss Crossbeam 540; Centaur U: DPSS: $\lambda = 532$ нм, $W = 50$ МВт; $\lambda = 632$ нм, $W = 5$ МВт) и эллипсометрии (Auto-Se (Horiba)) исследовались шероховатые пленки серебра, полученных электроосаждением из цианидно-тиоцианатного электролита с последующим анодным растворением поверхностного слоя. В результате толщина пленок составила 0,25; 0,50 и 1,25 мкм. Часть образцов была модифицирована НЧ Ag ($R=10$ нм) из водного гидрозоля серебра путем послойной физической адсорбцией ($N_{\text{слой}} \sim 5 \cdot 10^{12}$ см⁻²).

Электронно-микроскопические изображения образцов свидетельствуют о различиях в расположении кристаллитов серебра, а так же агрегации частиц на пленках, модифицированной НЧ Ag. Эллипсометрическое исследование показало красное смещение максимума действительной части $\text{Re}(\varepsilon(\omega))$ спектральной диэлектрической проницаемости $\varepsilon(\omega)$ в длинноволновую сторону, что объясняется изменением эффективности генерации поверхностных плазмонов за счет увеличения шероховатости $\langle \xi \rangle^2$. Сопоставление теоретического распределения и экспериментально измеренной функции $\varepsilon(\omega)$ позволило установить ширину запрещенной зоны исследуемых пленок. Ширина варьировалась от $E_0 \approx 0,7$ эВ до $E_0 = 1,4$ эВ.

Изучение спектров комбинационного рассеяния серебряных пленок, показало, что при лазерном возбуждении длинами волн $\lambda = 532$ нм и $\lambda = 632$ нм интенсивность пленок со слоями НЧ Ag составила 10^3 , что на один-два порядка выше интенсивности чистых шероховатых пленок. Данное увеличение интенсивности

наблюдалось при нерезонансном возбуждении образцов длиной волны $\lambda = 632$ нм (пик плазмонного резонанса для образцов зарегистрирован на $\lambda \approx 405$ нм). Рассчитанное значение фактора Парселла дает значение усиления локального поля в 10^2 . Предполагаем, что различие в экспериментальных и теоретических значениях усиления связано со вкладом в генерацию поверхностных плазмонов рассеяния плазмонного взаимодействия в агрегатах НЧ Ag пленки. Учитывая эти вклады в изготовлении оптических сенсоров на основе плазмонного резонанса, можно заметно повысить их эффективность и сократить затраты на производство.

Об экспериментальной реализации теоретически предсказанных новых сплавов Гейслера. Спиновый бесщелевой полупроводник FeCrTiAl

Коренистов Павел Сергеевич

Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения РАН

korenistov@imp.uran.ru

В последние годы для поиска новых материалов, благодаря возросшим компьютерным мощностям, используют DFT расчеты, с помощью которых, в частности, можно предсказывать термодинамически стабильные структурные состояния [1–3]. Результаты таких предсказаний часто используют для синтеза новых сплавов и соединений, в том числе сплавов Гейслера [4, 5].

В основе планируемой работе лежат предсказания, выполненные К. Гао в 2019 [1]. В своей работе, с помощью высокопроизводительного отсева, в основе которого лежат DFT расчеты, он предсказал 17 новых спиновых бесщелевых полупроводников (СБП), которые могут кристаллизоваться в структуру с симметрией Y -типа и имеют малые значения E_{CH} (E_{CH} – convex hull energy; обозначает термодинамическую устойчивость по отношению к стабильной фазе в данном фазовом пространстве). В соединениях, в которых наблюдаются СБП-состояния, благодаря особенностям электронной структуры вблизи уровня Ферми E_F , а именно – наличию энергетической щели для электронных состояний со спином вниз и нулевой щели для состояний со спином вверх, может возникать близкая к 100 % спиновая поляризация носителей заряда. В таких материалах переход электронов из валентной зоны в зону проводимости может происходить практически без затрат энергии, что является перспективным для использования таких соединений в новых энергетически эффективных устройствах электроники и спинтроники [6, 7].

Цель данной работы – рассказать о теоретико–экспериментальном подходе, направленном на поиск новых сплавов Гейслера, который включает в себя:

1. Описание метода, позволяющего предсказать термодинамически–стабильные структурные состояния соединения.
2. Выбор сплава для экспериментальной реализации и анализ свойств, входящих в него элементов (температура плавления, давление паров жидкой фазы и т.д.).
3. Выбор метода приготовления сплава.

На текущий момент выполнен анализ работы [1], для экспериментального изучения выбрано 4 соединения: FeCrTiAl, FeCrHfAl, MnCrNbAl и NiFeMnAl, имеющие малые значения $E_{CH} < 0.06$ eV/atom.

В дальнейшем планируется приготовить данные соединения методом дуговой плавки, определить режим отжига для получения упорядоченной структуры и изучить свойства полученных материалов, сравнить их с сигнатурами СБП–состояний.

Список публикаций:

- [1] Q. Gao, I. Opahle, H. Zhang // *Physical Review Materials*. 2019. V. 3. № 2. p. 024410.
[2] J. He, S. S. Naghavi, V. I. Hegde, M. Amsler, C. Wolverton // arxiv.org/abs/1802.04875.
[3] J. He, K. M. Rabe, C. Wolverton // *MRS Bull.* 2022. V. 47. № 6. P. 559.
[4] S. Anand, M. Wood, Y. Xia, C. Wolverton, G. J. Snyder // *Joule*. 2019. V. 3. № 5. P. 1226.
[5] H. Zhu et al. // *Nature Communications*. 2019. V. 10. № 1. P. 270.
[6] D. Rani, L. Bainsla, A. Alam, K. G. Suresh // *Journal of Applied Physics*. 2020. V. 128. № 22. P. 220902.
[7] Z. Yue, Z. Li, L. Sang, X. Wang // *Small*. 2020. V. 16. № 31. P. 1905155.

Структура, электрические и магнитные свойства интерметаллических соединений марганца Mn_3X ($X = Al, Ga, Ge$) после различных обработок

Коренистов Павел Сергеевич

Семяникова Алена Александровна, Ирхин Валентин Юрьевич, Пилюгин Виталий Прокофьевич, Марченкова Елена Борисовна, Марченков Вячеслав Викторович

Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН

Марченков Вячеслав Викторович, д. ф.-м. н.

korenistov@imp.uran.ru

Синтез, исследование структуры и физических свойств интерметаллических соединений на основе марганца Mn_3X ($X = Al, Ga, Ge$ и др.) представляют большой фундаментальный и практический интерес, поскольку в них могут наблюдаться состояния антиферромагнетика, скомпенсированного ферромагнетика, топологического полуметалла и др. Они обладают необычными, весьма чувствительными к внешним воздействиям магнитными и электронными характеристиками, что можно использовать для практических применений. Структура таких соединений, а, следовательно, и их электронные и магнитные характеристики, может сильно зависеть от способов приготовления и обработки. Поэтому представляет интерес изучение взаимосвязи структуры, электронных и магнитных свойств таких материалов. Цель данной работы - изучение роли особенностей структуры, зависящей от способа приготовления и обработки сплава, в формировании электрических и магнитных характеристик интерметаллических соединений марганца Mn_3X ($X = Al, Ga, Ge$).

Объемные поликристаллические сплавы Mn_3X ($X = Al, Ga, Ge$) были синтезированы в индукционной печи в атмосфере очищенного аргона. Приготовленные слитки отжигали в течение 72 ч при 650°C в атмосфере аргона с последующим охлаждением до комнатной температуры. Затем сплавы подвергались быстрой закалке (БЗР) из расплава и интенсивной деформации кручением (ИДК). БЗР-ленты получали из объемных соединений при комнатной температуре под давлением 0.28 атм в атмосфере очищенного аргона при скорости охлаждения $\sim 10^4$ - 10^5 град/сек. ИДК-пластины получали в наковальнях Бриджмена под давлением ~ 10 ГПа с последующим поворотом одной наковальни относительно другой. Аттестация литых и подвергнутых обработке соединений выполнена методами рентгеноструктурного анализа и сканирующей электронной микроскопии в Центре коллективного пользования «Испытательный центр нанотехнологий и перспективных материалов» (ЦКП) ИФМ УрО РАН. Измерения электросопротивления, эффекта Холла и намагниченности также проводили в ЦКП УрО РАН.

В результате проведенных исследований показано, что БЗР- и ИДК-обработка приводит к существенному изменению микроструктуры соединений Mn_3X ($X = Al, Ga, Ge$), что проявляется в поведении их электросопротивления, намагниченности и эффекте Холла. Полученные результаты обсуждаются в рамках существующих теоретических представлений.

Исследования выполнены за счет гранта Российского научного фонда (22-22-00935).

Исследование локальных тензоров сольватированного 5-мерного пептида

Кочкин Андрей Сергеевич^{1,2}

Теников Кирилл Андреевич¹, Сальникова Регина Евгеньевна², Агапов Иван Евгеньевич²

²Алтайский государственный университет

¹Алтайский государственный технический университет

¹Старостенков Михаил Дмитриевич, д.ф.-м.н.

andre211@mail.ru

Сольватированный 5-мерный пептид — это пептидная молекула, состоящая из пяти аминокислотных остатков, каждый из которых связан с сольватирующими группами, такими как водород, кислород или азот. В контексте белковой химии сольватирование относится к процессу, в котором молекула взаимодействует с молекулами растворителя, образуя гидратированный комплекс. Сольватированные пептиды могут использоваться для изучения взаимодействия пептида с окружающей средой, так как сольватационные группы могут изменять свойства молекулы, такие как растворимость и реакционная способность.

Изучение сольватированных 5-мерных пептидов имеет большую актуальность в различных областях науки и технологии, включая материаловедение и нанотехнологии. Например, сольватированные пептиды могут использоваться для разработки новых материалов, таких как наночастицы [1, 2], которые могут быть использованы для доставки лекарств и других биологически активных веществ в организм. Изучение

сольватированных пептидов также имеет важное значение для биологической науки в целом, так как пептиды играют важную роль во многих биологических процессах, включая метаболизм.

В настоящее время компьютерные симуляции широко используются для изучения этих процессов, так как они могут либо подтвердить, либо опровергнуть научные гипотезы, которые в противном случае могли бы быть невозможны для проверки. Более того, использование компьютерных моделей позволяет экономить деньги, так как эксперименты в реальных условиях могут быть очень дорогими. С помощью компьютерных технологий можно создавать сложные абстрактные модели и приближаться к изучению реальных объектов.

Анализ локальных тензоров деформации сольватированного 5-мерного пептида представляет собой сложную задачу, требующую детального понимания структуры и динамики системы, а также использования передовых вычислительных методов. Для вычисления тензора локальной деформации можно использовать тензор градиента деформации, который описывает деформацию материала в ответ на приложенные силы или напряжения. Для этого необходимо сравнить положения соседних атомов или групп атомов в разные моменты времени во время моделирования молекулярной динамики. Для моделирования сольватированного 5-мерного пептида используется подход, основанный на создании модели атомов пептида, связанных химическими связями, а также окружающих молекул растворителя, которые взаимодействуют между собой. Для моделирования сольватированного 5-мерного пептида необходимо учитывать его структуру и динамику, а также окружающие молекулы растворителя. Это является сложной задачей, требующей использования передовых вычислительных методов, например моделирования молекулярной динамики и анализа данных.

В рамках нашего исследования модель пептида представляется в виде набора атомов, соединённых химическими связями, а окружающие молекулы растворителя - в виде набора частиц с собственными взаимодействиями. Тензор деформации характеризуется девятью скалярными величинами, которые записываются в виде матрицы [3, 4]:

$$T_{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_x & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \sigma_y & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \sigma_z \end{pmatrix} \quad (1)$$

В ходе работы в LAMMPS [5] и OVITO [6] было выполнено моделирование по вычислению локальных тензоров деформации на основе относительного движения соседних частиц сольватированного 5-мерного пептида. А именно, мы проанализировали деформацию объёма от деформации сдвига и зависимость выходного тензора деформации от выходного тензора растяжения.

Полученные результаты позволяют нам сделать следующие выводы: в ходе исследования обнаружено, что тензор деформации пептида обратно пропорционален тензору растяжения, в то время как объёмная деформация прямо пропорциональна деформации сдвига. Полученные результаты могут дать ценную информацию о структуре и динамике пептида, а также о его взаимодействиях с окружающими молекулами. Однако, такой анализ требует использования передовых вычислительных методов и инструментов анализа.

Список публикаций:

- [1] Брагин А. О. // Компьютерный анализ связи конформационных пептидов с аллергенностью белков: специальность 03.01.09 "Математическая биология, биоинформатика": автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата биологических наук. Новосибирск. 2013. 17 с.
- [2] Володькин А. А., Арцис М. И., Миль Е. М. // Прогнозирование свойств модифицированных пептидов методом квантовой химии. Вестник Технологического университета. 2020. Т. 23. № 3. С. 23-26.
- [3] Старов А. В. Воронкова Г.В. // Теория упругости. Курс лекций с примерами решения задач. Волгоград: ВолгГАСУ, 2015.
- [4] Якубке Х. Д., Ешкайт Х. // Аминокислоты, пептиды, белки. М: Мир. 1985. С. 92-94.
- [5] LAMMPS Molecular Dynamics Simulator // <https://lammps.org>.
- [6] Ovito. Simulation visualization // <https://www.ovito.org>.

Изучение и сравнение электронных структур интеркалатных систем Fe_xTiSe_2 и Ti_xTiSe_2

Кузнецова Александра Юрьевна

Сулов Евгений Андреевич, Титов Александр Натанович

Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения РАН

Титов Александр Натанович

kau@imp.uran.ru

Кристаллическая структура дихалькогенидов титана TiX_2 (X – S, Se, Te) представляет собой слои Ti-X-Ti, связанных между собой ковалентной связью, между слоями существует слабая Ван-дер-Ваальсовой связь. Благодаря межслоевому пространству существует возможность обратимо внедрять атомы или даже целые

молекулы. На рис. 1 представлена структура соединений TiX_2 и отмечены позиции для интеркалантов. При этом полученные новые материалы будут иметь другие свойства отличны от свойств матричной фазы.

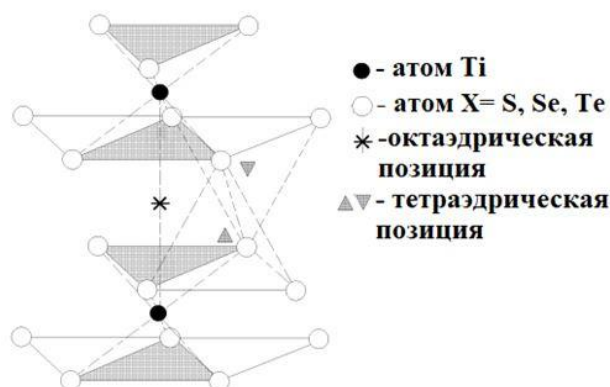


рис.1 Структура слоистых дихалькогенидов титана

Соединения Me_xTiSe_2 (Me – 3d-металлы), вызывают интерес в виду изменения их магнитных и электрических свойств. Такие эффекты связывают с изменением электронной структуры. В работе [1] было проведено исследование системы Ti_xTiSe_2 ($x > 0,5$) методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (XPS). Результаты XPS показали, что присутствие атомов Ti в межслоевом пространстве приводит к образованию связи $Ti-Ti$ между атомами титана в регулярных позициях решетки и атомами в межслоевом пространстве. Применимость метода ЭДС для изучения электронной структуры была показана в работах [2, 3].

Исследование системы Ti_xTiSe_2 при концентрациях в диапазоне $0 < x < 0,5$ и представление о природе связей также вызывают интерес. Однако в литературе данных по соединениям с малыми концентрациями титана не представлено.

Нами было проведено исследование электронной структуры системы Ti_xTiSe_2 при $x < 0,5$, а также проведен сравнительный анализ систем Fe_xTiSe_2 и Ti_xTiSe_2 . На рисунке 2 (а) показана зависимость параметра решетки c от концентрации металла в Me_xTiSe_2 . Для системы Fe_xTiSe_2 в интервале $0 < x < 0,2$ параметр c линейно уменьшается, что говорит о сжатие кристаллической решетки, такой же эффект наблюдается и для системы Ti_xTiSe_2 . При дальнейшем увеличении концентрации железа в системе параметр c остается постоянным, а для системы Ti_xTiSe_2 в интервале $0,2 < x < 0,5$ параметр c монотонно увеличивается, что сопровождается изменением кристаллической решетки с гексагональной до моноклинной.

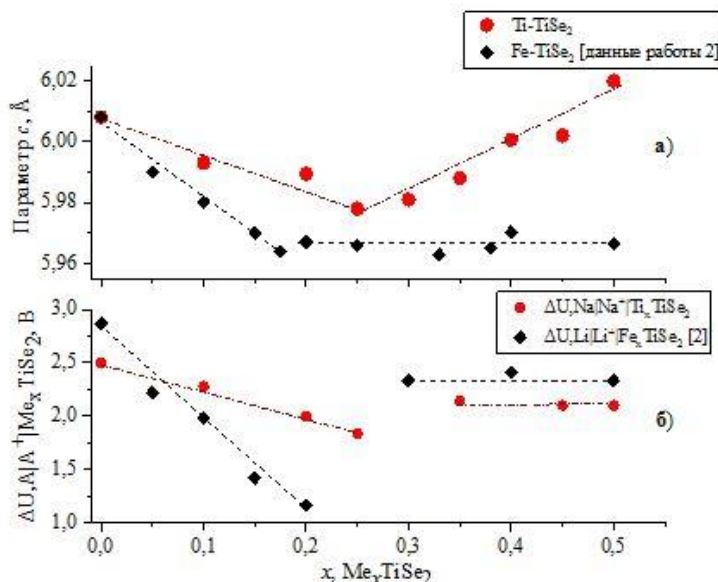


рис.2. Зависимость параметра элементарной решетки c (а) и значения ΔU электрохимических ячеек (б) от содержания металла в Me_xTiSe_2 .

В работе [2] была исследована система $Fe-TiSe_2$ методом ЭДС с помощью электрохимических ячеек $Li|Li^+|Fe_xTiSe_2$. На рис. 2 (б) показана концентрационная зависимость значения ΔU от содержания металла в системе Me_xTiSe_2 . Скачкообразное изменение значений ЭДС при составе $Fe_{0,25}TiSe_2$, авторы работы [2] объяснили изменением природы связей в системе. Связи $Ti-Fe-Ti$ разрываются и образуются связи $Fe-Fe$ в

межслоевом пространстве. Данные были подтверждены спектральными методами (XPS, XAS, ResPES). Нами была получена концентрационная зависимость значения ΔU от содержания металла в системе Ti_xTiSe_2 методом ЭДС с помощью электрохимических ячеек $Na|Na^+|Ti_xTiSe_2$ (рис.2 (б)). Также как и для системы Fe_xTiSe_2 интервале $0 < x < 0,25$ наблюдается уменьшение ЭДС, что говорит об образовании ковалентных центров Ti-Ti вдоль оси z, при составе $Ti_{0,25}TiSe_2$ происходит скачок ЭДС, в связи с этим ковалентные центры разрываются и образуются связи интеркалированных атомов Ti-Ti вдоль плоскости xy. Данные подтверждаются спектрами, представленные в работе [1].

Таким образом, в системе Ti_xTiSe_2 наблюдается процесс образования локализованных связей при упорядочении ($x=0,25$ и $x=0,5$) между титанами координированными интеркалантами.

Список публикаций:

[1] A. S. Shkvarin et al. // *Inorganic Chemistry*. 2020. V. 60. № 1. P. 185-194.

[2] A.S. Shkvarin et al. // *RSC Advances*. 2016. V 6. P. 106527-106539.

[3] E. A. Suslov, et al. // *The Journal of Physical Chemistry A*. 2021. V 125. № 9. P. 1981-1986.

Уточнение стехиометрии титаната- ниобата стронция методом Ритвельда

Макаренко Андрей Александрович

НИИ физики Южного федерального университета

Куприна Ю.А., к.ф.-м.н.

eamakaren@sfedu.ru

В настоящее время исследованиями оксидов со структурой типа перовскита (ОСП) установлено, что они характеризуются большим разнообразием физических свойств, встречающихся в различных сочетаниях. Многие из них обладают особенными электрическими и магнитными свойствами. Большинство соединений, которые имеют структуру типа перовскита, являются многофункциональными материалами. Перовскиты проявляют определенные интересные химические и физические свойства: они могут обладать электронными структурами как изоляционного, так и металлического характера и даже полуметаллического со спин-поляризованной электропроводностью, могут проявлять сверхпроводимость, магнитные порядки от антиферромагнитного до ферри-ферромагнитного, также могут содержать в себе ферроатомные смещения атомов или ионную проводимость и каталитические свойства. Перовскиты зачастую обладают многими из этих свойств одновременно, проявляя мультиферроичность. Широкий спектр свойств обусловлен композиционной гибкостью перовскитовой структуры ABO_3 [1-3].

Рентгеноструктурный анализ — это метод исследования строения тел, использующий явление дифракции рентгеновских лучей, метод исследования структуры вещества по распределению в пространстве и интенсивностям рассеянного на анализируемом объекте рентгеновского излучения. Рентгеноструктурный анализ является основным методом определения структуры кристаллов. При исследовании кристаллов он даёт наибольшую информацию. Основным подходом к решению задачи уточнения кристаллической структуры при съемке рентгенограмм с поликристаллических образцов является метод предложенный в 1969 г. голландским исследователем Х.М. Ритвельдом. Метод основан на гипотезе об определенной структурной модели изучаемого соединения, которая позволяет рассчитать его теоретическую порошковую дифракционную картину. Все последующие этапы уточнения структуры необходимы для того, чтобы добиться лучшего соответствия между теоретической (расчетной) и экспериментальной дифракционными картинками.

В ходе работы была создана модель перовскита $SrTi_{1/2}Nb_{1/2}O_3$ в кубической фазе с различными соотношениями катионов Ti и Nb. Полученные данные относительных интенсивностей рефлексов путем обработки модельных рентгенограмм методом Ритвелда сравнивались с рентгенограммой образцов кристалла $SrTi_{1/2}Nb_{1/2}O_3$. После проведения полнопрофильного анализа методом Ритвельда удалось уточнить параметр элементарной ячейки $a = 3.9014 \text{ \AA}$ и уточнить стехиометрию со следующим процентным содержанием двух фаз.

Результат уточнения стехиометрии двойного перовскита показывает, что в B подрешетке содержится 0.85%Ti и 0.15%Nb. При этом процентное содержание масс кристаллических фаз резко изменилось: 80% $SrTiO_3$ и 20% $SrTi_{0,85}Nb_{0,15}O_3$. Удалось доказать, что при синтезе происходит независимое структурообразование как простого перовскита $SrTiO_3$, так и двойного $SrTi_{0,85}Nb_{0,15}O_3$.

Список публикаций:

[1] Е.Г. Фесенко. Семейство перовскита и сегнетоэлектричество. М. Атомиздат, 1972 г., 248с.

[2] Pickett WE, Singh DJ. *Phys Rev B* 1996;53:1146.

[3] Kobayashi K-I, Kimura T, Sawada H, Terakura K, Tokura Y. *Nature* 1998;395:677

Метод сканирующей рентгеновской фотоэлектронной микроскопии (SPEM) и его реализация в синхротронных центрах

Меренцов Александр Ильич

Институт физики металлов им. М.Н. Михеева Уральского отделения РАН

Alexander.Merentsov@urfu.ru

Синхротронное излучение (СИ) является мощным инструментом в руках учёных, позволяющим изучать кристаллическую, молекулярную, электронную структуру различного рода материалов. В современных синхротронных центрах реализуется большое число экспериментальных методик (спектроскопия поглощения, фотоэлектронная спектроскопия, томография, дифракция рентгеновского излучения и фотоэлектронов и многие другие), позволяющие исследовать свойства веществ в разных агрегатных состояниях. Один из методов, реализуемых на источниках СИ, является сканирующая рентгеновская фотоэлектронная микроскопия (PEEM, X-PEEM, SPEM), позволяющая получать информацию не только о топологии поверхности кристаллического образца, но и о его локальной электронной структуре. Рентгеновское излучение, попадая на образец, вызывает испускание вторичных электронов (фотоэлектронов). Эти вторичные электроны ускоряются до 10 – 30 кЭв, фокусируются и позволяют получить увеличенное изображение исследуемой поверхности. Первое сообщение о применении метода PEEM относится к 1933 году, когда Эрнст Брюхе представил изображение катода, освещённого ультрафиолетом [1]. За долгие годы методика претерпела значительные изменения, и в настоящее время существуют лабораторные фотоэлектронные микроскопы третьего поколения, использующие в качестве источника излучения УФ-лампы (до 40 эВ) или рентгеновские трубки (до 1486 эВ). Однако, наибольшее распространение методика получила в синхротронных центрах, поскольку позволяет использовать в качестве первичного излучения рентген в широком диапазоне энергий с возможностью её варьирования.

В докладе будет подробно рассказано о линиях ESCA Microscopy [2,3] (синхротрон ELETTRA, Италия) и HERMES (синхротрон SOLEIL, Франция) [4]. На примерах слоистых замещённых систем $\text{Cr}_x\text{Ti}_{1-x}\text{Se}_2$, $\text{Cr}_x\text{Ti}_{1-x}\text{S}_2$, $\text{V}_x\text{Ti}_{1-x}\text{Se}_2$ и $\text{V}_x\text{Nb}_{1-x}\text{Se}_2$ будет показано, как метод SPEM позволяет увидеть в на первый взгляд однородных кристаллах области с различным химическим составом и химической связью. Несмотря на отсутствие методики SPEM на действующих в настоящее время в России синхротронах ВЭПП-3 (ИЯФ, г. Новосибирск) и КИСИ-Курчатов (НИЦ «Курчатовский институт», г. Москва), вкратце будет рассказано об этих синхротронных центрах и строящемся в настоящее время синхротроне СКИФ (г. Кольцово, Новосибирская область).

Список публикаций:

[1] Brüche E. // *Zeitschrift für Physik*. 1933. V. 86. P. 448–450.

[2] Abyaneh M. K., Gregoratti L., Amati M., Dalmiglio M. and Kiskinova M. // *e-J. Surf. Sci. Nanotech*. 2011. V. 9. P. 158-162.

[3] Zeller P., Amati M., Sezen H., Scardamaglia M., Struzzi C., Bittencourt C., Lantz G., Hajlaoui M., Papalazarou E., Marino M., Fanetti M., Ambrosini S., Rubini S., Gregoratti L. // *Phys. Status Solidi*. 2018. V. 215. P. 1800308.

[4] Belkhou R., Stanescu S., Swaraj S., Besson A., Ledoux M., Hajlaoui M. and Dalle D. // *Journal of Synchrotron Radiation*. 2015. V. 22(4). P.

Зависимость фазового состава тонких плёнок $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ от температуры термообработки

Меренцова Кристина Александровна

*Изюров Владимир Владимирович, Артемьев Михаил Сергеевич, Десятников Иван Александрович,
Дубинин Станислав Сергеевич*

Институт физики металлов имени М. Н. Михеева Уральского отделения РАН

Носов Александр Павлович

merencovak@imp.uran.ru

Гематит (оксид железа $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$) обладает уникальными магнитными свойствами: он является антиферромагнетиком ниже температуры Морино 260 К и «слабым» ферромагнетиком в диапазоне температур от 260 К до температуры Нееля 950 К, выше которой он парамагнитен. Гематит – центрально-симметричный антиферромагнетик с четной главной осью симметрии, в котором «слабый» ферромагнетизм обусловлен симметрией магнитных подрешеток [1] и анизотропным сверхобменным взаимодействием [2]. Гематит рассматривается как перспективный материал для антиферромагнитной спинтроники [3]. Основные исследования физических свойств гематита были выполнены на объемных материалах (моно- и поликристаллах). Однако, в последние годы интерес к нему усилился в связи с потенциальными приложениями в наноспинтроники как материала для тонких пленок и слоев в наногетероструктурах. Целью работы было получение тонких плёнок гематита на монокристаллических подложках сапфира ($\text{c-Al}_2\text{O}_3$) и исследование их фазового состава в зависимости от температуры послеростовой термообработки на воздухе.

Пленки α - Fe_2O_3 толщиной 100 нм были получены методом магнетронного распыления стехиометрической мишени на переменном токе в атмосфере 90%Ar + 10% O_2 . В процессе распыления температура подложки составляла 473К. После получения пленки термообработывали на воздухе при температурах 673 К и 1023 К в течении 3 часов. Рентгеноструктурные исследования проводили на дифрактометре PANalytical Empyrean. Измеряли спектры в режиме $\theta - 2\theta$.

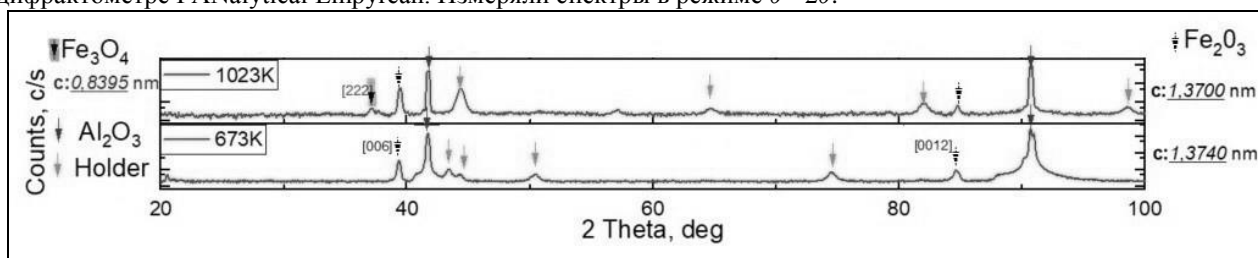


рис.1. Дифрактограммы образцов, термообработанных при температурах 673К и 1023 К. Черные стрелки – рефлексы от подложки с- Al_2O_3 . Серые стрелки – рефлексы от держателя подложек дифрактометра (holder). Пунктирные стрелки – рефлексы от фазы α - Fe_2O_3 . Черные стрелки с серым фоном – рефлексы от фазы магнетита Fe_3O_4

На рисунке 1 видно, что при термообработке при 973 К образец является однофазным. Единственной фазой является гематит. При 1023 К начинается формирование дополнительной фазы магнетита Fe_3O_4 .

Параметр решетки c фазы α - Fe_2O_3 для образца, термообработанного при 673 К, соответствует параметру решетки c для объёмного монокристалла [4]. При 1023 К величина этого параметра уменьшается, что может свидетельствовать о сжатии решетки.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «Функция», номер госрегистрации 122021000035-6).

Список публикаций:

- [1] I. Dzyaloshinsky // JETP. 1957. 32. P. 1547.
- [2] T. Moriya // Phys. Rev. 1960. 120. P. 91.
- [3] V. Baltz, A. Machnon, M. Tsoi et. al. // Rev. Mod. Phys. 2018. 90. P. 012002.
- [4] https://materials.springer.com/isp/crystallographic/docs/sd_0545731

Исследование особенностей атомной и электронной структуры нанокомпозитов ПАНИ/Me: методы рентгеновской и оптической спектроскопии поглощения

Недоедкова Ольга Вадимовна

Лысенко Виктория Юрьевна, Шматко Валентина Анатольевна

Южный федеральный университет

nedoedkova@sfedu.ru

В настоящее время одним из самых распространенных и изучаемых проводящих полимеров является полианилин (ПАНИ), который получил наибольшее внимание из-за его уникальной структуры, высокой химической стабильности и высокой электрической проводимости при соответствующем модифицировании. Варьирование проводящих свойств полианилина, в основе которых лежит его атомная и электронная структуры, возможно путем модификации полимера различными соединениями, в частности солями металлов.

В работе исследованы атомная и электронная структура полианилина и композитов на его основе спектральными методами: УФ и видимой спектроскопии и рентгеновской спектроскопии поглощения. Образцы исследования получены бескислотным методом с дальнейшим термостатированием [1]. В ходе проведения работы было выявлено, что применение $\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ и $\text{ZrCl}_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ в реакции полимеризации анилина приводит к изменениям электронной структуры полимера в составе нанокомпозита, а изменение температуры термостатирования не влечет существенных изменений в структуре полимера в композитах. На основе проведенной интерпретации спектров рентгеновского поглощения полианилина установлено, что цирконий взаимодействует с полимером через азот из иминной группы.

На основе полученных методом УФ-видимой спектроскопии данных была определена ширина оптической запрещенной зоны (E_g) для чистого полианилина и композитов по графикам Тауца. Выявлено, что добавление модифицирующих добавок $\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ и $\text{ZrCl}_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ в структуру ПАНИ в процессе синтеза приводит к уменьшению запрещенной зоны и подобные материалы имеют перспективу применения в суперконденсаторах и оптических устройствах.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-22-00459 и частично в рамках реализации ГЗ ЮНЦ РАН на 2022 г. № гр. проекта 121100500084-2.

Авторы выражают благодарность Мясоедовой Т.Н. за предоставление образцов для исследования, научным руководителям: профессору кафедры ФНС ЮФУ Яловега Г.Э., доценту кафедры ФНС ЮФУ Шматко В.А.

Список публикаций:

[1] Шматко В.А., Мясоедова Т.Н., Яловега Г.Э. Электронная структура полианилина, модифицированного солями меди и циркония // Оптика и спектроскопия. 2020. Вып. 5. Стр.617

Влияние механоактивации на сегнетоэлектрические материалы со структурой перовскита по данным рентгеновской спектроскопии XANES

Нечитайлова Ирина Олеговна

Глазунова Екатерина Викторовна, Поносова Екатерина Евгеньевна, Шеметова Элина Ивановна,

Нефёдов Михаил Александрович, Ермакова Александра Михайловна,

Сухарина Галина Борисовна, Срабионян Василий Валерьевич, Авакян Леон Александрович, Бугаев Лусеген Арменакович

Южный федеральный университет

Сухарина Галина Борисовна

inec@sfedu.ru

Сегнетоэлектрические материалы со структурой перовскита находят широкое применение в электронной технике, радиотехнике, приборостроении, измерительной и вычислительной технике и многих других областях, поскольку обладают уникальными физико-химическими свойствами, которые во многом зависят от малых структурных искажений, обусловленных различного рода воздействиями, в частности, механоактивацией. В связи с этим, перспективной задачей является изучение влияния механоактивации на структуру и свойства перовскитных сегнетоэлектрических материалов.

Целью настоящей работы стало установление корреляций состав - структура - свойства сегнетоэлектриков со структурой перовскита на основе модельного соединения $\text{PbFe}_{0.5}\text{Ta}_{0.5}\text{O}_3$ (PFT).

Проведено исследование малых структурных искажений, образованных в результате механоактивации PFT, при помощи метода XANES (X-ray Absorption Near Edge Structure) и компьютерного моделирования. Выполнен анализ спектров рентгеновского поглощения за K -краем атома железа и L_3 -краем атома тантала в образцах PFT до и после механоактивации. Для установления наиболее вероятного локального окружения поглощающего атома тантала были рассчитаны XANES-спектры, соответствующие различным структурным моделям (рис. 1).

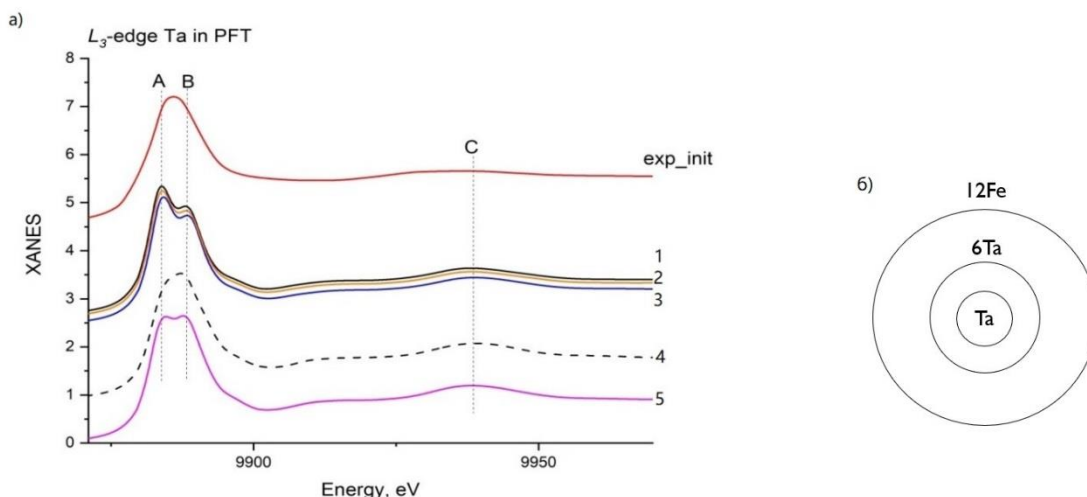


рис.1 (а) - Сравнение XANES-спектров за L_3 -краем атома тантала в PFT, соответствующих различным моделям локальной атомной структуры исследуемого образца; (б) - Схематичное изображение координационных сфер (3 и 5) для наиболее вероятной структурной модели - (4).

В процессе проведенного анализа было выявлено, что изменение формы экспериментальных Ta L_3 -XANES-спектров в области основного максимума является результатом изменения локального окружения

поглощающего атома, а именно соответствует различному упорядочению атомов железа и тантала. В результате выполненного исследования установлена наиболее вероятная локальная атомная структура синтезированного образца PFT (рис. 1, модель 4).

Список публикаций:

- [1] Фесенко Е. Г. // Семейство перовскитов и сегнетоэлектричество. 1972. С. 248
 [2] Geguzina G. A. // *Ferroelectrics-magnetics with the perovskite structure. Ferroelectrics*, 2020. № 568. С. 85.
 [3] Нестеров А. А., Панич А. А. // Технологии синтеза порошков сегнетоэлектрических фаз. Ростов н/Д: Изд-во ЮФУ. 2010.
 [4] Sukharina G. B. et al // *Structure and Properties of Ferroelectric Materials after Mechanoactivation. Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*. 2018. № 82 (7) С. 909 – 912.

Особенности фазовых превращений в сплавах титана с ванадием и молибденом: расчеты из первых принципов

Огнев Сергей Олегович

Национальный исследовательский Томский политехнический университет

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН

Святкин Леонид Александрович

soo1@tpu.ru

На сегодняшний день достаточно перспективным применением электронно-лучевого аддитивного производства (ЭЛАП) является 3D-печать деталей и узлов из сплавов на основе титана, которые могут быть использованы в аэрокосмической отрасли при производстве компонентов двигателей, таких как роторы, лопатки компрессора и компоненты гидравлической системы. Огромное количество современных исследований посвящено изучению шероховатости поверхности, микроструктуры и механических свойств 3D-напечатанных титановых сплавов, содержащих ванадий, молибден, алюминий и другие легирующие элементы. Установлено, что стабильность микроструктуры и объемная доля вторых фаз определяются распределением легирующих элементов в процессе высокоскоростного охлаждения ванны расплава и многократных циклов нагрева-охлаждения при нанесении последующих слоев в 3D-печати. Целью данной работы является первопринципное исследование фазовых переходов в системах Ti-V, Ti-Mo и Ti-V-Mo.

Для установления влияния элементного состава на структурно-фазовую стабильность титанового сплава была рассчитана полная энергия E_p различных фаз сплавов $Ti_{1-x}V_x$, $Ti_{0,95-x}V_{0,05}Mo_x$ и $Ti_{1-x}Mo_x$. Все расчеты выполнялись в рамках теории функционала плотности с использованием оптимизированного сохраняющего норму псевдопотенциала Вандербилта и приближения виртуального кристалла, реализованного в пакете программ ABINIT. Для описания обменных и корреляционных эффектов использовалось приближение обобщенного градиента в форме Пердью-Бурке-Эрнцерхофа. Энергия обрезания при разложении волновой функции по базису плоских волн, составила 1630 эВ.

Для проведения структурной оптимизации и релаксации сплавов $Ti_{1-x}V_x$, $Ti_{0,95-x}V_{0,05}Mo_x$ и $Ti_{1-x}Mo_x$ использовалась расчетная ячейка с 4 атомами металла (рис. 1). Поскольку согласно экспериментальным исследованиям α' и α'' фазы твердого раствора молибдена или ванадия в титане близки по геометрии связей и соотношениям параметров решетки к чистому α -Ti, то при структурной оптимизации α' и α'' фаз соотношение между параметрами решетки фиксировалось близким к соотношению между параметрами решетки чистого α -Ti. Также была проведена оптимизация структуры α'' фаз без сохранения соотношения между параметрами решетки как в чистом α -Ti, такая структура обозначена в работе для удобства обсуждения как $\alpha_{\text{иск}}''$ фаза. Релаксация считалась завершенной при значении сил, действующих на атомы, менее 25 мэВ/Å. На каждой итерации самосогласования электронной плотности в α , α'' и β фазах рассматриваемых соединений собственные значения гамильтониана рассчитывались соответственно на сетках k точек $16 \times 9 \times 10$, $16 \times 9 \times 10$ и $15 \times 9 \times 10$, генерируемой по схеме Монхорста-Пака. Рассчитанные в работе параметры решетки чистого α - и β -Ti составляют $a_\alpha = 2,933 \text{ \AA}$, $c_\alpha = 4,669 \text{ \AA}$, $a_\beta = 3,258 \text{ \AA}$.

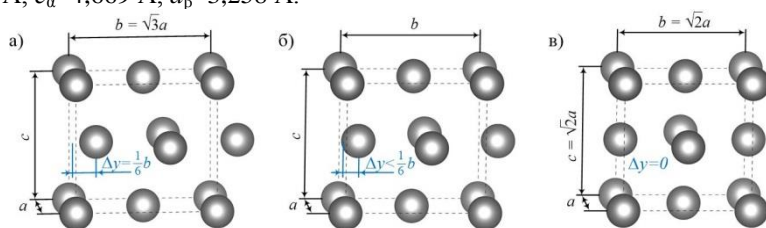


рис.1. Расчетные ячейки α' (а), α'' (б) и β (в) фаз сплавов $Ti_{1-x}V_x$, $Ti_{0,95-x}V_{0,05}Mo_x$ и $Ti_{1-x}Mo_x$. a , b и c – параметры решетки, Δy – смещение атомных слоев относительно друг друга

В работе вычислены разности полной энергии ($E_p - E_a$) в расчете на один атом сплава в зависимости от содержания легирующих элементов (рис. 2). Установлено, что в $Ti_{1-x}V_x$ до концентрации ванадия ~ 14 ат.% α'' фаза является энергетически неустойчивой: при релаксации она переходит в α' фазу. При концентрациях ванадия от 14 до 36 ат.% α'' фаза становится энергетически наиболее выгодной, а при более высоких концентрациях – выгодна β фаза $Ti_{1-x}V_x$. За счет тепловой энергии фазовые переходы будут происходить при более низких концентрациях ванадия: так при комнатной температуре за счет тепловой энергии $\sim kT$ фазовое превращение ($\alpha' \rightarrow \beta$) возможно при концентрациях ванадия ~ 22 ат.%, а фазовое превращение ($\alpha'' \rightarrow \beta$) – при ~ 24 ат.%. С учетом температурного фактора за счет близких по значениям полной энергии решеток α' и α'' до концентрации ванадия 40 ат.% фазовый переход ($\alpha' \rightarrow \alpha''$) возможен, наоборот, при более высоких концентрациях. Однако обратный переход ($\beta \rightarrow \alpha'$) при комнатной температуре будет наблюдаться при более низких концентрациях, чем ($\beta \rightarrow \alpha''$) переход. Таким образом, за счет тепловой энергии в зависимости от концентрации ванадия возможны фазовые переходы ($\alpha' \rightarrow \beta$) и ($\beta \rightarrow \alpha'' \rightarrow \alpha'$).

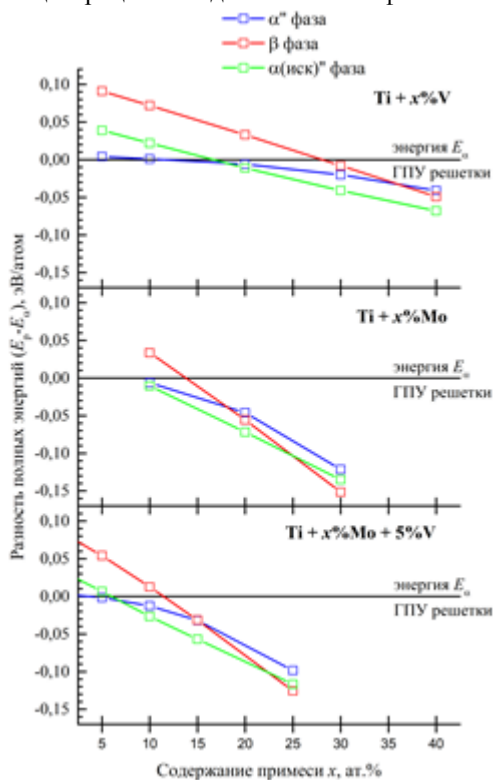


рис.2. Разность полной энергии ($E_p - E_a$) в расчете на один атом сплава в зависимости от содержания легирующих элементов.

В случае легирования титана молибденом картина фазовых превращений качественно схожа с легированием ванадием, но все фазовые переходы происходят при более низком содержании Mo в $Ti_{1-x}Mo_x$. Показано, что в $Ti_{1-x}Mo_x$ α'' фаза является энергетически неустойчивой до концентрации молибдена ~ 9 ат.%, которая превращается в β фазу при концентрациях молибдена ~ 18 ат.%. За счет тепловой энергии фазовые переходы ($\alpha' \rightarrow \beta$) и ($\alpha'' \rightarrow \beta$) возможны при концентрациях молибдена ~ 11 и 13 ат.% соответственно. При легировании титана одновременно ванадием и молибденом рассматриваемые фазовые переходы наблюдаются при общей концентрации атомов Mo и V в решетке $Ti_{0.95-x}V_{0.05}Mo_x$ близкой к содержанию Mo в $Ti_{1-x}Mo_x$ для таких переходов. Таким образом, добавление 5 ат.% ванадия в $Ti_{1-x}Mo_x$ понижает на 2-3 ат.% концентрации Mo необходимые для рассматриваемых фазовых переходов.

Выявлено, что, если учесть сильные искажения в геометрии связей в решетке α -Ti при добавлении примесей V и Mo, то возможно формирование искаженной фазы $\alpha_{иск}''$, характерной чертой которой является заметно меньшее смещение Δu атомных слоев относительно друг друга (рис. 1) по сравнению с α'' фазой. Полная энергия решетки этой фазы заметно ниже в широком диапазоне концентраций легирующих элементов (рис. 2). С учетом тепловой энергии фазовый переход ($\alpha' \rightarrow \alpha_{иск}''$) будет наблюдаться при заметно более низких концентрациях ванадия и молибдена, чем фазовый переход ($\alpha' \rightarrow \alpha''$), а фазовый переход ($\alpha_{иск}'' \rightarrow \beta$) будет происходить при заметно больших концентрациях легирующих элементов, чем переход ($\alpha'' \rightarrow \beta$).

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант №21-19-00795).

Особенности структуры, электро- и магнитосопротивления монокристалла MnBi_2Te_4

Первалова Александра Николаевна¹

Фоминих Богдан Михайлович^{1,2}, Наумов Сергей Владимирович¹, Марченкова Елена Борисовна¹,
Марченков Вячеслав Викторович^{1,2}

¹Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН

²Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина

Марченков Вячеслав Викторович, д.ф.-м.н.

domozhirova@imp.uran.ru

В настоящее время получение и исследование магнитных топологических материалов является актуальным направлением физики конденсированного состояния, поскольку известно, что наличие нетривиальной топологии электронной зонной структуры и магнетизма может привести к реализации необычных квантовых состояний, таких как квантовый аномальный эффект Холла, аксионный изолятор и полуметалл Вейля [1]. Таким материалом является обнаруженный в последние годы антиферромагнитный топологический изолятор MnBi_2Te_4 [2]. Кристаллическая структура данного соединения состоит из семикратных слоев $\text{Te-Bi-Te-Mn-Te-Bi-Te}$, между которыми действуют слабые силы Ван-дер-Ваальса, поэтому данный материал легко раскалывается вдоль плоскости $(00l)$ и должен обладать большой анизотропией физических свойств, в частности, электросопротивления и магнитосопротивления, которые и были исследованы в данной работе.

Монокристалл MnBi_2Te_4 был выращен согласно методике, схожей с методом кристаллизации из раствора в расплаве. Аттестация его структуры 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.

На рис. 1 представлена температурная зависимость электросопротивления $\rho(T)$ монокристалла MnBi_2Te_4 , измеренная в плоскости $(00l)$, а также перпендикулярно данной плоскости. Обнаружена анизотропия сопротивления: электросопротивление, измеренное перпендикулярно плоскости $(00l)$ исследуемого монокристалла, на порядок величины превышает сопротивление, измеренное в данной плоскости. Для сравнения на рисунке также приведена температурная зависимость электросопротивления поликристаллического образца MnBi_2Te_4 . Видно, что при температуре ~ 24 К на зависимостях $\rho(T)$ имеется пик, соответствующий температуре Нееля данного соединения. Подобный пик наблюдается также в магнитном поле 1 Тл, однако отсутствует в полях 5 Тл и 9 Тл, что согласуется с результатами работы [3] и может быть связано с магнитным фазовым переходом в ферромагнитное состояние под действием внешнего магнитного поля выше 5 Тл. Таким образом, в результате проведенных исследований была обнаружена анизотропия в сопротивлении монокристалла MnBi_2Te_4 , которая, по-видимому, должна также наблюдаться и в других электронных характеристиках данного соединения, в частности, в его оптических свойствах. Такие исследования проводятся в настоящее время.

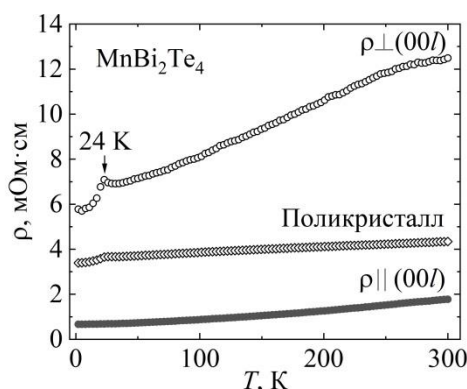


рис. 1. Температурная зависимость электросопротивления MnBi_2Te_4 .

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).

Список публикаций:

[1] Bernevig B.A., Felser C., Beidenkopf H. // *Nature*. 2022. V. 603. P. 41–51.

[2] Otrokov M.M., Klimovskikh I.I., Bentmann H. et al. // *Nature*. 2019. V. 576. P. 416–422.

[3] Lee S.H., Zhu Y., Wang Y. et al. // *Phys. Rev. Res.* 2019. V.1. P. 012011(R).

Структура активных центров медьсодержащих цеолитов: спектроскопия рентгеновского поглощения и компьютерное моделирование

Поносова Екатерина Евгеньевна

Ермакова Александра Михайловна, Сухарина Галина Борисовна, Гладченко-Джевелекис Янис Николаевич, Шеметова Элина Ивановна, Прядченко Василий Владимирович, Богданов Вячеслав Артемович, Дурыманов Вениамин Александрович, Авакян Леон Александрович, Бугаев Лусеген Арменакович

Южный федеральный университет

Сухарина Галина Борисовна, к.ф.-м.н.

ponosova02@bk.ru

Широкий интерес к изучению структуры медьсодержащих цеолитов обусловлен важностью задачи поиска эффективных катализаторов реакции получения метанола из метана. В исследовании структуры данных материалов критически важным является определение строения активных металл-кислородных центров. Данные центры, обычно, неравномерно распределены в каркасе цеолита и имеют сложное атомное строение в области ближнего окружения атомов меди. В зависимости от способа синтеза могут получаться катализаторы с различной локальной атомной структурой активных центров меди, что влияет на конечные свойства катализатора[1-3]. Поэтому установление взаимосвязи условий синтеза, структуры и свойств является важным этапом при разработке высокоэффективных катализаторов для задач преобразования метана в метанол.

В данной работе рассматривались активные центры меди в Cu-MOR, полученные с использованием двух типов синтеза: твердофазного и жидкофазного, алгоритм синтеза описан в работе[3]. Исследование локальной атомной структуры активных центров меди в цеолитах типа морденит (MOR) было выполнено на разных этапах каталитического цикла. Для получения структурной информации применялся комплексный подход, включающий спектроскопию рентгеновского поглощения и компьютерное моделирование с использованием теории функционала плотности (DFT) и элементов машинного обучения. Установление наиболее вероятных гипотетических моделей в Cu-MOR было выполнено на основе квантово-химических расчетов в программном комплексе Quantum Espresso[4]. Теоретическое моделирование Cu K-XANES спектров было реализовано с использованием метода конечных разностей в программном комплексе FDMNES[5].

По результатам проведенного анализа экспериментальных и теоретических Cu K-XANES спектров, определены наиболее вероятные модели локальной атомной структуры образовавшихся активных центров меди в цеолите Cu-MOR. Установлено наличие нескольких типов медных центров, содержащих цепочки Cu-Cl-C и Cu-O-Cu, в каркасе Cu-MOR, полученном в процессе твердофазного синтеза. Выполнена генерация различных структурных моделей активных центров цеолитов Cu-MOR и сформирована база данных для структур активных центров меди и соответствующих спектров Cu K-XANES для применения методов машинного обучения к задаче прогнозирования структурных параметров, определяющих локальную атомную структуру активных центров меди в Cu-MOR.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект № 23-22-00438.

Список публикаций:

- [1] E.M.C. Alayon, M. Nachtegaal, A. Bodi, M. Ranocchiari, J.A. van Bokhoven // *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2015. V. 17. PP.7681–7693.
- [2] V. V. Srabionyan, G.B. Sukharina, T.I. Kurzina, V.A. Durymanov, A.M. Ermakova, L.A. Avakyan, E.M.C. Alayon, M. Nachtegaal, J.A. van Bokhoven, L.A. Bugaev // *J. Phys. Chem. C*. 2021. V. 125. PP.25867–25878.
- [3] S.E. Bozbag, E.M.C. Alayon, J. Pecháček, M. Nachtegaal, M. Ranocchiari, J.A. van Bokhoven // *Catal. Sci. Technol.* 2016. V. 6. PP.5011–5022.
- [4] P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini et al. // *J. Phys. Condens. Matter*. 2009. V. 21. PP.395502.
- [5] Y. Joly // *Phys. Rev. B*. 2001. V. 63. PP.125120.

Электронная структура поверхностного сплава Ag_2Bi на поверхностях (111) и (423) серебра

Терентьева Дарья Витальевна

Национальный исследовательский Томский Политехнический университет

Святкин Леонид Александрович

dvt17@tpu.ru

Введение. В настоящее время электроника основана на использовании процесса переноса заряда электрона. Однако, возможности традиционной полупроводниковой электроники в части миниатюризации и быстродействия подходят к концу, что приведет к нарушению закона Мура в ближайшее время. Для

увеличения быстродействия вычислительных устройств предлагается использовать не только заряд, но и спин в качестве переносчика информации. В связи с этим возникает необходимость разработки новых материалов, электронные состояния которых могут быть разделены по спину. Примером таких материалов могут быть поверхностные сплавы с осажденными атомами тяжелых элементов, например, висмута или свинца на поверхностный слой серебра. Особый интерес для изучения представляют вицинальные поверхности, на которых за счет ступенчатой формы поверхности возникает дополнительный потенциал, позволяющий получать уникальные электронные состояния. Целью данной работы является выявление особенностей влияния вицинальности поверхности на энергетические спектры поверхностного сплава BiAg_2 на поверхностях $\text{Ag}(111)$ и $\text{Ag}(423)$.

Все расчеты в данной работе были выполнены в рамках теории функционала электронной плотности методом проекционно-присоединенных волн, реализованным в пакете программ VASP. Обменно-корреляционный потенциал рассматривался с использованием обобщенно-градиентного приближения в форме, предложенной Пердью-Бурке-Эрнцверхом. Для рассмотрения поверхностного сплава BiAg_2 , были рассмотрены ячейки гладкой поверхности (111) со структурой $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$, гладкой поверхности со структурой $(2\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$, вицинальной поверхности (423). Гладкие поверхности моделировались пленкой из 21 слоя. Толщина этих пленок составила $\sim 65 \text{ \AA}$, толщина вакуумного слоя – $\sim 12 \text{ \AA}$. Вицинальная поверхность (423) была представлена ассиметричной 28-ми слойной пленкой толщиной $\sim 70 \text{ \AA}$. В поверхностном слое этой пленки находилось 5 атомов серебра и 2 атома адсорбата Bi. Атомы адсорбата располагались таким образом, что один из них лежал на террасе, а другой формировал ступень. Также в рассмотрение были взяты монослой, бислои (поверхностный слой с атомами адсорбата и однослойной подложкой из серебра), тетраслои (поверхностный слой с атомами адсорбата и трехслойной подложкой из серебра) с поверхностями (111)- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ и (423).

В работе были рассчитаны электронные энергетические спектры поверхностных сплавов гладкой поверхности со структурой $(2\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ и вицинальной поверхности (423). Поскольку поверхностный сплав BiAg_2 обладает большим спин-орбитальным расщеплением, то в структурах $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ и $(2\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ присутствуют 6 поверхностных зон, находящихся в запрещенной зоне. Первое поверхностное состояние находится полностью в занятой области и пересекает точку $\bar{\Gamma}$ при энергии $-0,3 \text{ эВ}$. Второе является частично занятым: оно вырождается в точке $\bar{\Gamma}$ при энергии $0,6 \text{ эВ}$ и пересекает уровень Ферми при $k = \pm 0,2 \text{ \AA}^{-1}$. Третье является полностью незанятым. В окрестности точки $\bar{\Gamma}$ при энергии $1,5 \text{ эВ}$ она двухкратно вырождена. При $k = 0,2 \text{ \AA}^{-1}$ состояние p_y орбитали расщепляется на две ветви восходящих парабол, а при $k = -0,2 \text{ \AA}^{-1}$ поверхностное состояние обрывается.

Вицинальность достаточно сильно влияет на энергетический спектр (спектры представлены на рисунке 1). Во-первых, наблюдается смещение электронных состояний в точке $\bar{\Gamma}$ по энергии. Во-вторых, вдоль направления $\bar{\Gamma X}$ наблюдается две ветви зоны p_y орбитали (p_x орбитали, ориентированные параллельно ступени), слабо зависящие от волнового числа. В-третьих, электронные состояния становятся более диффузными. Для поверхности (111) наблюдается эффект закручивания спина. То есть наблюдается четкое разграничение в ориентациях спинов: спин ориентирован по оси x вдоль направления $\bar{\Gamma K}$ ($\bar{\Gamma Y}$), и по оси y вдоль направления $\bar{\Gamma M}$ ($\bar{\Gamma X}$). Характер же спиновой текстуры вицинальной поверхности (423) очень сложен в анализе. Это связано с тем, что электроны, чьи спины ориентированы по направлению вдоль ступени присутствуют как вдоль этого направления ($\bar{\Gamma Y}$), так и перпендикулярного ему ($\bar{\Gamma X}$). То же самое наблюдается и с электронами, чьи спины ориентированы по направлению перпендикулярного ступени.

Для более подробного изучения влияния вицинальности, были построены и исследованы энергетические спектры монослоев, бислоев и тетраслоев поверхностей. При переходе от монослойной системы к бислоиной наблюдается лишь смещение зон по энергиям за счет дополнительного потенциала, создаваемого большим количеством атомов серебра. Тем самым, исследование эволюции спектров показало, что трех слоев подложки в виде серебра достаточно для формирования общей картины спектра 28-ми слойной пленки.

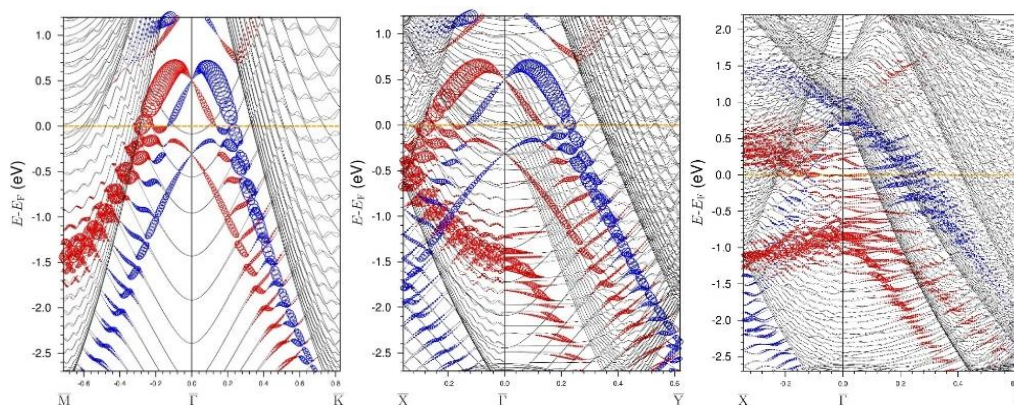


рис. 1. Электронный энергетический спектр поверхностных сплавов BiAg_2 гладкой поверхности со структурой $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ (а), $(2\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ (б) и вициальной поверхности (423) (б, г, е). Синим цветом отмечены поверхностные состояния с преимущественным вкладом p_x орбиталей, красным – p_y орбиталей.

Таким образом, были исследованы поверхностные электронные состояния поверхностных сплавов $\text{BiAg}_2/\text{Ag}(111)$ и $\text{BiAg}_2/\text{Ag}(423)$. Установлено, что вдоль направления параллельного ступени наблюдается размытие электронных орбиталей p_x и p_y . Вдоль направления перпендикулярного ступени наблюдается эффект влияния ступенчатого потенциала на поверхности в виде образования двух бездисперсных p_y состояний вдоль направления $\overline{\Gamma X}$. Причем захватывается только состояние p_y ориентации, а для p_x состояний (p орбитали, ориентированные перпендикулярно ступени) дисперсия не изменяется. Наблюдаемая бездисперсность состояний висмута, состоящих преимущественно из p орбиталей, ориентированных параллельно ступени, в направлении перпендикулярном ступени в поверхностном сплаве $\text{BiAg}_2/\text{Ag}(423)$ говорит о захвате этих состояний ступенчатым потенциалом, что может быть в дальнейшем использовано для формирования каналов передачи информации.

Электронное строение кристаллов Mg_2NA ($A = \text{F}, \text{Cl}$) с решеткой антихалькопирита

Тимофеев Вячеслав Сергеевич

Кемеровский государственный университет

Гордиенко Алексей Болеславович, д.ф.-м.н.

slava.timofeev.mail@gmail.com

Фторнитриды и хлорнитриды металлов представляют собой относительно малоизученный класс неорганических материалов. И при этом кристаллы Ve_2NF и Ve_2NCl показывают себя как широкозонные полупроводники [1] с достаточной обширной областью применения. Отсутствие данных для кристаллов Mg_2NF и Mg_2NCl в структуре антихалькопирита определяет актуальность проведения данного исследования для определения необходимости синтеза. Кристаллы Mg_2NF и Mg_2NCl были синтезированы в виде порошка в структуре антикасуэллсилверита [2], которая считается промежуточной между структурами каменной соли и антихалькопирита. Следовательно, синтез исследуемых кристаллов в структуре антихалькопирита при определенных условиях возможен.

Целью работы является определение равновесной конфигурации элементарной ячейки и электронной структуры гипотетических кристаллов Mg_2NA ($A = \text{F}, \text{Cl}$) со структурой антихалькопирита, которая отличается от классической структуры халькопирита обратным порядком следования катионов и анионов.

Вычисления выполнялись с использованием пакета программ Quantum ESPRESSO [3] в локальном приближении теории функционала плотности методом плоских волн. В расчетах использовались сохраняющие норму псевдопотенциалы PZ [4]. Энергии обрезки для плоских волн и электронной плотности составляли 100 и 1000 Ry соответственно, \mathbf{k} -сетка размерности $4 \times 4 \times 4$ была сгенерирована методом Монхорста-Пака [5]. Структура и начальные параметры решетки были взяты из работы [1], и результат оптимизации представлен в таблице:

Кристалл	$a, \text{Å}$	$c, \text{Å}$	c/a	u	$\text{Ve-N}, \text{Å}$	$\text{Ve-A}, \text{Å}$	$\text{Ve-Be}, \text{Å}$
Mg_2NF	4.46	9.36	2.1	0.25	1.9	2.02	3.3
Mg_2NCl	5.03	9.67	1.92	0.25	1.92	2.45	4.25

Зонная структура кристаллов Mg_2NA ($A = F, Cl$) представлена на рис.1. Исследуемые кристаллы представляют собой полупроводники с ширинами запрещенных зон: для Mg_2NF $E_g = 1.66$ эВ, для Mg_2NCl $E_g = 2.83$ эВ. Валентные области обоих кристаллов содержат четыре группы зон с одинаковым распределением по состояниям. Нижняя группа из двух зон принадлежит s-состояниям атома A ($A = F, Cl$), далее идет группа зон s-состояний атома N, и следующие две группы формируются p-состояниями атомов A и N соответственно (снизу вверх). Состояния атома Mg представлены преимущественно в зоне проводимости. Ключевой зависимостью, при переходе от кристалла Mg_2NF к Mg_2NCl , помимо увеличения ширины запрещенной зоны, можно считать уменьшение полной ширины валентной области от 25 до 16 эВ, что определяется уменьшением запрещенных промежутков между группами зон.

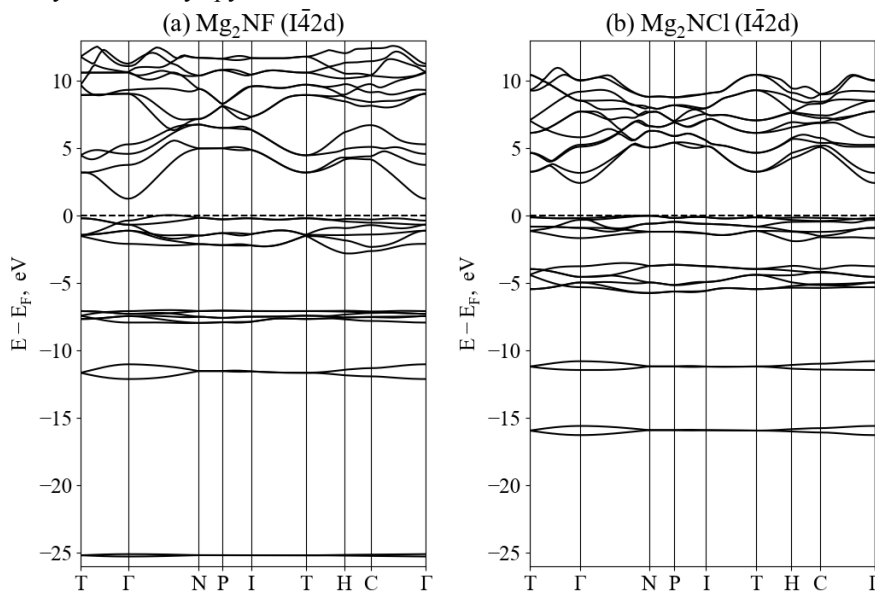


рис.1. Зонная структура кристаллов Mg_2NF (a) и Mg_2NCl (b)

Список публикаций:

- [1] A.B. Gordienko, Yu.M. Basalaeв, V.S. Timofeev // *Electronic structure and lattice dynamics of compounds Be_2NA ($A = F, Cl, Br, I$) with antichalcopyrite structure*, *Solid state Physics*, 2023, V. 65, I. 1, P. 73.
- [2] M. A. Brogan, R. W. Hughes, R.I. Smith, D.H. Gregory // *Structural studies of magnesium nitride fluorides by powder neutron diffraction*, *Journal of Solid State Chemistry*, 2012, V. 185, P. 213.
- [3] P. Giannozzi, et al. // *QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials*. *J. Phys.: Condens. Matter*. 2009, V. 21, P. 395502.
- [4] J. P. Perdew, A. Zunger // *Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems*. *Phys. Rev. B.*, 1981, V. 23, I. 10, P. 5048.
- [5] H.J. Monkhorst, J.D. Pack // *Special points for Brillouin-zone integrations*. *Phys. Rev. B*, 1976, V. 13, P. 5188.

Влияние корреляционных эффектов на электронную структуру и магнитные свойства $CuCo_2S_4$: расчеты в рамках DFT+DMFT

Трифонов Иван Олегович

Скорняков Сергей Львович

Уральский федеральный университет имени первого президента России Б. Н. Ельцина

Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения РАН

Скорняков Сергей Львович, д.ф.-м.н.

probrakeup@gmail.com

Согласно современным представлениям физики конденсированного состояния выделяют два класса сверхпроводников. К первому относятся системы, поведение которых описывает теория Бардина-Купера-Шриффера (БКШ): в них сверхпроводящие куперовские пары образуются за счет электрон-фононного взаимодействия. Во второй класс относят соединения, в которых существенную роль в образовании куперовских пар предположительно играют корреляционные эффекты и спиновые флуктуации [1]. К таковым относятся широко известные высокотемпературные сверхпроводящие системы: купраты, пниктиды и халькогениды железа ($FeSC$) [2,3]. В последние годы активно ведется поиск новых сверхпроводящих соединений, чьи свойства также не описываются в рамках теории БКШ.

Экспериментально сверхпроводимость CuCo_2S_4 со структурой шпинели и критической температурой $T_c = 4.2$ К была подтверждена в 2021 году [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).

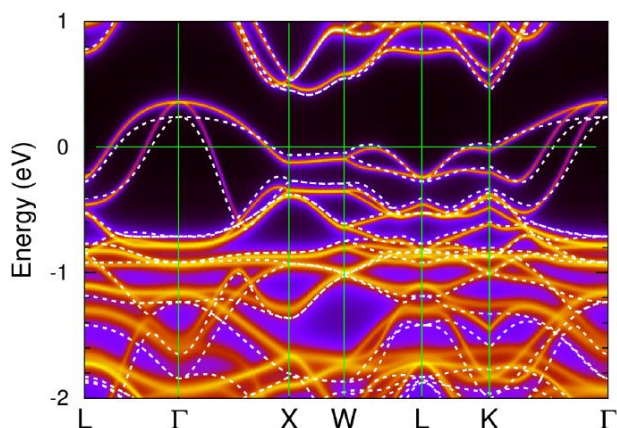


рис.1. Спектральная функция с угловым разрешением для CuCo_2S_4 , вдоль высокосимметричных направлений в зоне Бриллюэна, полученная методом DFT+DMFT (контуры) в сравнении с энергетическими зонами, рассчитанными обобщенным градиентным приближением (пунктирные линии).

Расчёты показали, 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 похожи, 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 $\frac{m^*}{m}$, значения которой составили 1.18 и 1.22 для t_{2g} и e_g состояний, соответственно. Полученные величины $\frac{m^*}{m}$ приблизительно в 2 раза меньше таковых в FeSC системах [2]. Полученные результаты говорят, о слабом влиянии локальных кулоновских корреляций на спектральные свойства CuCo_2S_4 .

Было выяснено, 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.1a) приводит к компактификации третьего листа поверхности Ферми (рис.1б). Получаемое преобразование поверхности Ферми может говорить о важности учета кулоновских корреляций для описания транспортных свойств CuCo_2S_4 .

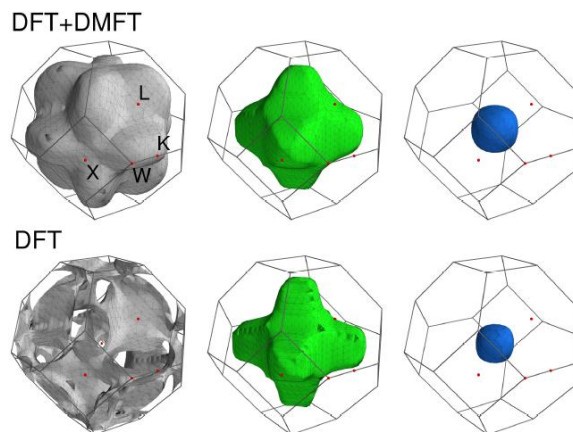


рис.2. Листы поверхности Ферми CuCo_2S_4 полученные методом DFT+DMFT (верхний ряд) для температуры $T = 290$ К и полученные с помощью обобщенного градиентного приближения (нижний ряд).

Было выяснено, 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.1) приводит к компактификации третьего листа поверхности Ферми (рис.2). Получаемое преобразование поверхности Ферми может говорить о важности учета кулоновских корреляций для описания транспортных свойств CuCo_2S_4 .

Рассчитанный флуктуирующий магнитный момент и локальный момент для 3d состояний кобальта равны 1.00 и 0.18 μ_B соответственно. Данные величины более чем в два раза меньше соответствующих характерных значений, получаемых в подходе DFT+DMFT для FeSC. Полученный результат был интерпретирован как следствие более слабых спиновых флуктуаций в CuCo_2S_4 , чем в FeSC. На этом основании было высказано предположение о неприменимости 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.

Список публикаций:

- [1] Hirsch J.E., Maple M.B., Marsiglio F. // *Physica C*. 2015. V. 514, P.1-8.
- [2] Nekrasov I.A., Pavlov N.S., Sadovskii M.V. // *JETP Letters*. 2015. V. 102. P. 30.
- [3] Yin Z.P., Haule K., Kotliar G. // *Nat. Mater.* 2011. V. 10. P. 932.
- [4] Jin Y.-Y., Sun S.-H., Cui Y.-W., Zhu Q.-Q., Ren Z., Cao G.-H. // *Phys. Rev. Materials*. 2021. V. 5. P. 074804.
- [5] Baskaran G. // *Phys. Rev. Lett.* 203. V. 91. P. 097003.

Исследование дефектов в цилиндрической капле нематического жидкого кристалла

Уткин Максим Алексеевич

Хазимуллин Максим Вильевич, Макаров Дмитрий Владимирович

Пермский государственный национальный исследовательский университет

Макаров Дмитрий Владимирович, к.ф.-м.н.

utkinmaksim@gmail.com

В работе численно исследуется структура капли нематического жидкого кристалла (НЖК) в слое с изотропной жидкостью, зажатым между двумя плоскопараллельными пластинами. Предполагается, что капля имеет цилиндрическую форму с одинаковыми диаметрами на верхней и нижней границах. Свободная поверхность капли НЖК образована вращением дуги окружности вокруг оси цилиндра. В середине слоя НЖК рассмотрено четыре основных дефекта: гиперболический точечный (НР), гиперболический кольцевой (НР), радиальный точечный (RP) и радиальный кольцевой (RR) – для нахождения, реализуемой конфигурации при заданных материальных параметрах системы [1]. Каждый дефект определяется характерным для него зарядом ядра и углом смещения.

Для описания искажений НЖК используется континуальная теория [2], в которой равновесная ориентационная структура слоя НЖК определяется из условия минимума полной свободной энергии. Преимущественная ориентация молекул жидкого кристалла задается с помощью вектора, называемого директором, направление которого в условии данной задачи определяется одним углом, отсчитанным от нижней пластины. Сцепление директора с пластинами и на свободной поверхности считается жестким и гомеотропным. Для описания конфигурации выбрана цилиндрическая система координат, основная плоскость которой располагается на нижней пластине, а ось аппликата вдоль ось цилиндра. Распределение директора жидкого кристалла в капле считается аксиально-симметричным, поэтому зависимость от азимутального угла отсутствует.

В результате решения с помощью методов конечных разностей и верхних релаксаций системы дифференциальных уравнений, полученной при минимизации функционала свободной энергии, построена фазовая диаграмма, определяющая области существования дефектов в цилиндрической капле. Так, при небольших контактных углах, которые соответствуют случаю «мостик-перетяжка» и малых значениях геометрического параметра, отвечающего за отношение диаметра капли на подложках к высоте слоя, устойчивой является конфигурация с дефектом НР. Увеличение геометрического параметра приводит к «сплющиванию» капли и переходу к конфигурации с дефектом НР. С ростом контактного угла происходит переход в RR. При больших контактных углах, соответствующих случаю «мостик-бочка», устойчивым состоянием становится конфигурация с RR при всех значениях геометрического параметра. Переход из конфигурации с НР в RR происходит при больших значениях геометрического параметра и при контактных углах вблизи случая прямого цилиндра.

Список публикаций:

- [1] Ellis P. W., Huang S., Klaneček S. et al. // *Physical Review E*. 2018. V. 97. P. 040701.
- [2] de Gennes P. G., Prost J. // *The Physics of Liquid Crystals*. Oxford: Clarendon Press, 1993. 596 p.

Электронные транспортные свойства топологического полуметалла PtSn₄

Фоминых Богдан Михайлович

Первалова Александра Николаевна, Наумов Сергей Владимирович, Марченков Вячеслав Викторович
Уральский федеральный университет имени первого президента России Б. Н. Ельцина

Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения РАН

Марченков Вячеслав Викторович, д.ф.-м.н.

fominykh@imp.uran.ru

Полуметаллы с узловыми линиями представляют собой класс топологических полуметаллов, в которых, в отличие от полуметаллов Вейля и Дирака, зоны пересекаются не в отдельных дискретных точках вблизи уровня Ферми, а вдоль некоторой линии в зоне Бриллюэна [1]. Одним из примеров таких материалов является топологический полуметалл PtSn₄, в котором точки Дирака образуют линию в зоне Бриллюэна, что было экспериментально подтверждено в работе [2]. Благодаря необычным состояниям как в объеме, так и на поверхности такие материалы могут проявлять многие экзотические транспортные свойства, такие как необычно большое магнитосопротивление, отрицательное продольное магнитосопротивление, большая подвижность носителей заряда. Поскольку причины, приводящие к некоторым особенностям их электронного транспорта, до сих пор однозначно не установлены, исследование электросопротивления и гальваномагнитных свойств таких материалов представляет большой интерес.

Целью данного исследования является изучение электронных транспортных свойств топологического полуметалла PtSn₄ для установления основных закономерностей их поведения и выявления возможных механизмов, лежащих в их основе.

Монокристаллы PtSn₄ 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 PtSn₄. Рентгеноструктурный анализ показал, что полученные монокристаллы имеют орторомбическую структуру с пространственной группой Ccca и параметрами решетки: $a \approx 6.31 \text{ \AA}$, $b \approx 11.33 \text{ \AA}$, $c \approx 6.27 \text{ \AA}$. Измерение сопротивления было проведено с использованием четырехконтактной методики при температурах от 4.2 до 300 К в магнитных полях до 10 Т.

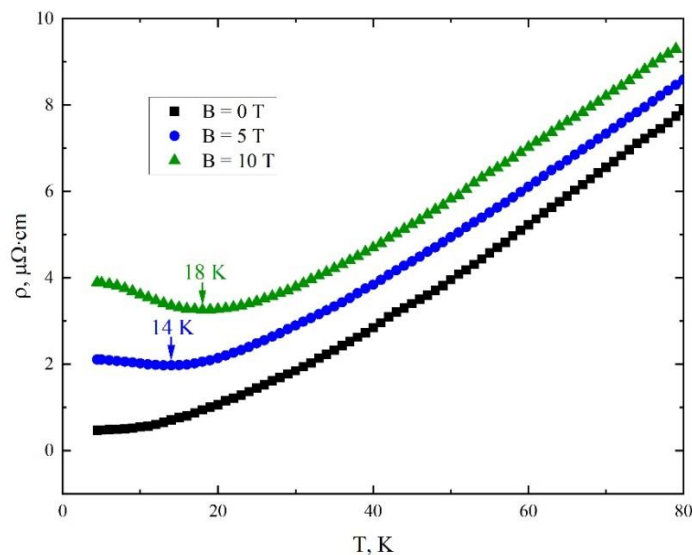


рис. 2. Температурные зависимости электросопротивления монокристалла PtSn₄ в магнитных полях 0 Т, 5 Т и 10 Т. Стрелками указаны значения температур, при которых достигается минимум на соответствующей зависимости.

В результате исследования установлено, что электросопротивление монокристалла PtSn₄ в нулевом магнитном поле зависит от температуры по квадратичному закону при низких температурах. Квадратичная температурная зависимость электросопротивления при низких температурах также наблюдалась в других топологических полуметаллах, в частности WTe₂ и MoTe₂ [3, 4]. Помимо электрон-электронного рассеяния, квадратичный по температуре вклад в электросопротивление может быть связан с рассеянием на поверхности образца. На температурной зависимости сопротивления в магнитных полях 5 Т и 10 Т можно заметить наличие

минимума при температурах 14 К и 18 К соответственно (рис. 1). Подобное поведение сопротивления наблюдалось в монокристалле WTe_2 и может быть объяснено 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 [3]. Помимо этого, из анализа данных по эффекту Холла были проведены оценки концентрации и подвижностей носителей тока. В рамках однозонной модели установлено, что основным типом носителей тока в исследуемом монокристалле $PtSn_4$ являются дырки с концентрацией $n = 6.8 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$ и подвижностью $\mu \approx 1950 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ при $T = 4.2 \text{ К}$.

Таким образом, в результате проведенных исследований были выявлены такие особенности электронного транспорта $PtSn_4$, как квадратичная зависимость электросопротивления при низких температурах, минимум на температурной зависимости сопротивления в магнитном поле, предложено другое по сравнению с известными объяснение данного минимума, оценены концентрация и подвижность носителей тока.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема “Спин”, № 122021000036-3).

Список публикаций:

[1] Yang M. X., Luo W., Chen W. // *Advances in Physics: X*. 2022. V. 7. №. 1. P. 2065216.

[2] Wu Y., Wang LL., Mun E., Johnson D.D., Mou D., Huang L., Lee Y., Bud'ko S.L., Canfield P.C., Kaminski A. // *Nature Physics*. 2016. V. 12. №. 7. P. 667-671.

[3] Перевалова А.Н., Наумов С.В., Подгорных С.М., Чистяков В.В., Марченкова Е.Б., Фоминых Б.М., Марченков В.В. // *Физика металлов и металловедение*. 2022. Т. 123. №. 11. С. 1131-1137

[4] Perevalova A. N., Naumov S. V., Marchenkov V. V. // *Metals*. 2022. V. 12. №. 12. P. 2089.

Электронная структура и магнитные свойства $MnTe$

Чернов Евгений Денисович

Лукоянов Алексей Владимирович

Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения РАН

Лукоянов Алексей Владимирович

chernov_ed@imp.uran.ru

Теллурид марганца – соединение, которое относится к классу халькогенидов и вызывает научный интерес. Известно, что все халькогениды марганца, в том числе и $MnTe$, являются антиферромагнитными изоляторами [1-4]. Для MnS и $MnSe$ стабильной кристаллической структурой будет фаза каменной соли, хотя MnS и $MnSe$ имеют и другие кристаллические фазы, – цинковой обманки и вюртцита. Однако теллурид марганца отличается от остальных халькогенидов марганца и кристаллизуется в стабильной фазе типа $NiAs$, хотя также имеет высокотемпературную фазу типа $NaCl$ [5]. В данной работе теоретические исследования теллурида марганца проводились при учете антиферромагнитного упорядочения $3d$ электронов марганца и различных спиновых конфигурациях. При расчете электронной структуры использовался программный пакет Quantum ESPRESSO [6] и метод DFT+U [7]. Значение параметра кулоновского взаимодействия составило 6.9 эВ и обменного взаимодействия 0.86 эВ. Исследование проводилось для трех кристаллических фаз: кубической $Fm\bar{3}m$ (номер 225 в списке кристаллографических групп), гексагональной $R\bar{6}_3mmc$ (номер 194 в списке кристаллографических групп) и орторомбической $Pnma$ (номер 62 в списке кристаллографических групп). В элементарной ячейке содержалось 4 атома Mn (2 первого типа Mn1 и 2 второго типа Mn1) и 4 атома Te. В ходе исследования было показано, что гексагональная фаза является изолятором с шириной щели порядка 1 эВ, а остальные две фазы проявляют металлические свойства. Наиболее энергетически выгодной спиновой конфигурацией для орторомбической и гексагональной фаз будет конфигурация «↑↓↑↑». Также стоит отметить, что орторомбическая фаза обладает ферримагнитным упорядочением и величина магнитных моментов ионов марганца составила 1.88 и 3.32 μ_B . В свою очередь наибольшим магнитным моментом ионов марганца обладает кубическая фаза с величиной момента 4.48 μ_B . Таким образом, в ходе нашего исследования была выявлена наиболее энергетически выгодный тип магнитного упорядочения для гексагональной и орторомбической фазы, а также определена фаза с наибольшим магнитным моментом ионов марганца $MnTe$.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ (проект 20-02-00234).

Список публикаций:

[1] Baniewicz J. J., Heidelberg R. F., Luxem A. H. // *J. Phys. Chem*. 1961. Vol. 65 № 4. P. 615-617.

[2] Kunitami N., Hamaguchi Y., Shuinchiro A // *J. Physique*. 1964. Vol. 25. № 5 P.568-574.

[3] Yadarka H., Harada T., Hirahara E. // *J. Phys. Soc. Japan*. 1961. Vol. 17 № 5. P. 875-876.

[4] Uchida E., Kondoh H., Fukuoka N. // *J. Phys. Soc. Japan*. 1956. Vol. 11. № 1 P. 27-32.

[5] Hulliger F. // *Structure and Bonding* 1968. Vol. 4. P. 190.

[6] Giannozzi P., et al // *J. Phys.: Condens. Matter*. 2009. Vol. 21. 395502

[7] Anisimov V. I., Gunnarsson O. // *Phys. Rev. B*. 1991. Vol. 43. № 10. 7570.

Влияние циклической заморозки на динамику нанокластеров серебра на поверхности полипропиленовых и полиэфирных волокон

Шашков Денис Игоревич

Мальшико Вадим Владимирович, Джимак Степан Сергеевич

Кубанский государственный университет

ShiniX88@mail.ru

Наночастицы серебра (AgNPs) нашли применение во многих областях промышленности и медицины [1-3]. Последнее наиболее перспективно в случаях контаминации полирезистентными штаммами микроорганизмов, особенно при сочетанном использовании AgNPs и современных способов доставки наночастиц в инфицированные участки [4, 5]. Данная ситуация обусловлена физико-химическими и биологическими свойствами подобных наночастиц, в связи с чем благодаря их высокой бактерицидной, фунгицидной и противовирусной активности они все шире используются для придания антимикробных свойств раневым повязкам, шовному материалу, различным медицинским полимерам [2, 3]. Таким образом, становится целесообразным изучение динамики процессов образования AgNPs на поверхности материалов из полипропилена, имеющих медицинское назначение.

Для оценки состояния AgNPs на поверхности полипропилена был использован шовный материал «Монофил», состоящий из полипропиленовых волокон. Для сравнения был выбран шовный материал «Полиэстер», состоящий из волокон полиэфира этиленгликоля и терефталевой кислоты. Наночастицы серебра были получены методом кавитационно-диффузионного фотохимического восстановления. В качестве лиганда был использован поливинилпирролидон [6]. Для проведения эксперимента раствор наночастиц серебра разбавляли дистиллированной водой до концентрации 5 мкг/мл, после чего при термостатировании (60°C) добавляли желатин до конечной концентрации 0.9 %, что позволило перевести раствор в состояние геля [7]. Шовные материалы были разделены на отрезки длиной до 1 см, после чего отрезки погружали в полученный гель на 24 часа. Затем отрезки извлекали и проводили 10-кратный цикл заморозки/оттаивания. Для оценки состояния наночастиц на поверхности полимерных волокон выполняли электронную микроскопию.

Анализ полученных микрофотографий позволил выявить увеличение общего количества AgNPs после выполнения циклической заморозки/разморозки на поверхности шовного материала Монофил на основе полипропилена, однако при сравнительном анализе количества наночастиц различных размерных диапазонов были выявлены существенные различия их образования и расположения на волокне после воздействия минусовой температуры. Наблюдаемые изменения характеризовались тем, что при значительном увеличении количества наночастиц серебра размером 1-10 нм (в 8.8 раза) и частиц размером свыше 40 нм (в 3.8 раза), было отмечено увеличение количества наночастиц размером 25-40 нм на 44,0% и снижение среднего количества AgNPs размером 10-25 нм на 20.2 %. Таким образом, установленное увеличение количества небольших, наиболее функциональных наночастиц серебра, сопровождалось уменьшением количества наночастиц средних размеров. При анализе микрофотографий волокон полиэфира также отмечено возрастание общего количества наночастиц серебра. Выявлено увеличение в 1.8 раза среднего количества крупных частиц свыше 40 нм и в 3.3 раза наночастиц в пределах 25-40 нм. Таким образом, циклическая заморозка способствует повышенной сорбции AgNPs на поверхности полипропилена, что может быть использовано для изготовления изделий медицинского назначения.

Работа выполнена при финансовой поддержке госзадания Минобрнауки №FZEN-2023-006.

Список публикаций:

- [1] Потекаев А.И., Лысак И.А., Малиновская Т.Д. и др. // *Известия высших учебных заведений. Серия: Химия и химическая технология*. 2020. Т.63(3). С. 94–99.
- [2] Gherasim O., Puiu R.A., Bircă A.C. et al. // *Nanomaterials (Basel)*. 2020. V.10(11). P. 2318.
- [3] Pryshchepa O., Pomastowski P., Buszewski B. // *Adv. Colloid Interface Sci.* 2020. V. 284. P. 102246.
- [4] Basov A.A., Fedosov S.R., Malyshko V.V. et al. // *Journal of Wound Care*. 2021. V. 30(4). P. 312–322.
- [5] Popov K.A., Bykov I.M., Tsybalyuk I.Yu. et al. // *Medical News of North Caucasus*. 2018. V. 13(3). P. 525–529.
- [6] Dzhimak S.S., Sokolov M.E., Basov A.A. et al. // *Nanotechnologies in Russia*. 2016. V. 11. P. 835–841.
- [7] Dzhimak S.S., Goryachko A.I., Sokolov M.E. et al. // *Russian Physics Journal*. 2019. V. 62(2). P. 314–322.

Кристаллическая и электронная структура $\text{Cu}_{0.5}\text{ZrSe}_2$

Шкварин Алексей Сергеевич

Меренцов Александр Ильич, Постников Михаил Сергеевич, Титов Александр Натанович
Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения РАН
shkvarin@imp.uran.ru

Исследования мультиферроиков вызвали огромный научный интерес к материалам, в которых одновременно с магнитным возникает сегнетоэлектрический порядок. Повышение температуры упорядочения и усиление взаимодействия между электрической и магнитной подсистемами могут сделать эти материалы перспективными для практического применения. Нами был обнаружен аналог мультиферроика CuCrSe_2 – CuZrSe_2 , в котором медь распределена по тетраэдрическим позициям так же, как и в CuCrX_2 . Структура такого материала аналогична структуре дельтафосита (CuCrO_2) и может быть описана как решетка, состоящая из слоев MX_2 ($M = \text{Cr, Zr; X} = \text{S, Se}$), интеркалированных медью. В низкотемпературной фазе CuCrX_2 отсутствует центр симметрии, и она демонстрирует сегнетоэлектрическое упорядочение. Основная проблема в том, что температура перехода довольно низкая — для CuCrSe_2 она составляет около 50 К. Предположительно температуру перехода можно повысить замещением в подрешетке Cr. Однако все предыдущие попытки, предпринятые в этом направлении, привели к потере самого ценного свойства — нецентросимметричности решетки. Причиной этого является перераспределение атомов Cu из тетраэдрических позиций в октаэдрические, расположенные в центре симметрии элементарной ячейки. Кристаллическая структура Cu_xZrSe_2 в свою очередь при концентрациях меди более $x = 0.4$ располагает атомы меди в тетраэдрических позициях. Ранее мы подробно исследовали электронную и кристаллическую структуру совместно с физическими свойствами системы Cu_xZrSe_2 в концентрационном диапазоне $0 \leq x \leq 0.3$ [1,2]. В данной работе мы исследуем электронную структуру соединения $\text{Cu}_{0.5}\text{ZrSe}_2$ методами XPS (x-ray photoelectron spectroscopy), ResPES (resonant x-ray photoelectron spectroscopy) и XAS (x-ray absorption spectroscopy).

Кристаллическая структура изучена на поликристаллических образцах методом полнопрофильного уточнения в программном пакете GSAS [3]. Согласно уточнению атомы меди занимают тетраэдрические позиции в межслоевом пространстве.

Спектры XPS, XAS и ResPES для монокристалла $\text{Cu}_{0.5}\text{ZrSe}_2$ были получены на линии superESCA синхротрона Elettra (Триест, Италия). Все образцы были сколоты in situ в высоком вакууме при давлении ниже $1 \cdot 10^{-9}$ Торр. Энергии связи фотоэмиссии калибровали по уровню Ферми, измеренному на золотом эталоне. Спектры поглощения получены в режиме полного выхода электронов (TEY) с энергетическим разрешением около 0.1 эВ. Спектры остовных уровней показали хорошее качество монокристалла $\text{Cu}_{0.5}\text{ZrSe}_2$ и сколотой поверхности. Для остовных линий селена и циркония наблюдается сохранение формы линии и сдвиг около 0.55 эВ в сторону меньших энергий связи по сравнению с исходным ZrSe_2 . Одинаковый по величине и направлению сдвиг может означать сдвиг уровня Ферми в результате переноса электронов с интеркалированных атомов меди на решетку ZrSe_2 . Спектр валентной полосы значительно размывается, также наблюдается небольшое смещение спектра в сторону больших энергий. Оба этих эффекта обусловлены возникновением новых состояний, привнесенных атомами меди, в валентной полосе. Форма спектр поглощения меди меняется значительным образом. Пропадает часть пиков, характерных для атома меди в октаэдрическом положении. Это свидетельствует о тетраэдрической координации атома меди в $\text{Cu}_{0.5}\text{ZrSe}_2$.

Впервые выполнено исследование монокристаллического образца $\text{Cu}_{0.5}\text{ZrSe}_2$. Спектры валентной зоны и спектры остовных уровней демонстрируют изменение формы и энергетического положения, что объясняется тетра-координацией атомов меди в $\text{Cu}_{0.5}\text{ZrSe}_2$. Показано, что при тетра-координации меди характер химической связи является ионным и связан с переносом заряда от меди на ZrSe_2 . Не обнаружено следов Ti 3d/Cu 3d – гибридизации, характерной для химической связи интеркаланта с решёткой в случае окта-координации интеркаланта.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 22-13-00361).

Список публикаций:

- [1] Shkvarin A.S. et al. // *Specific features of the electronic and crystal structure of Cu_xZrSe_2 ($0 < x \leq 0.3$)*. *J. Mater. Chem. C*. 2020. Vol. 8, № 24. P. 8290–8304.
- [2] Shkvarin A.S. et al. // *Band Gap Width Control by Cu Intercalation into ZrSe_2* . *J. Phys. Chem. C*. 2019. Vol. 123, № 1. P. 410–416.
- [3] A. C. Larson and R. B. Von Dreele // *General Structure Analysis System (GSAS)*. *Los Alamos Natl. Lab. [Rep.]*. 2004. P. Report LAUR 86-748.

Устойчивость скирмионов в фрустрированных антферромагнитных/сегнетоэлектрических бислоях с треугольной решеткой

Юлдашева Алина Рифовна

Уфимский университет науки и технологий

Alina.yuldasheva.92@mail.ru

Магнитные скирмионы — наноразмерные топологически защищенные вихри спина — исследовались как потенциальные носители информации в устройствах спинтроники [1, 2, 3]. В этой работе рассмотрены магнитные и сегнетоэлектрические слои с треугольной решеткой. Скирмионы обычно образуются под действием внешнего магнитного поля в нецентросимметричных нанопленках или на интерфейсах в гетероструктурах и межфазных, нарушающих симметрию, сверхрешетках. В данной работе мы рассмотрели магнитный и сегнетоэлектрический слои с треугольной решеткой.

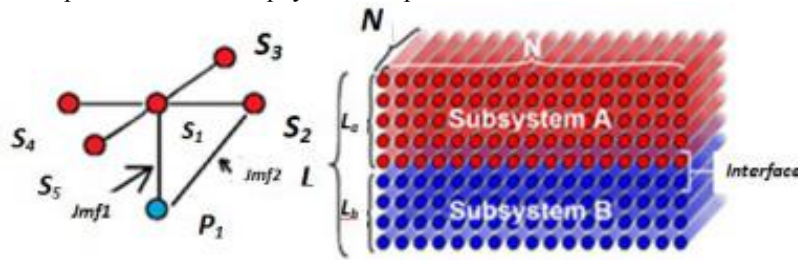


рис.1. Схематичное представление магнитоэлектрического взаимодействие на границе между магнитными и сегнетоэлектрическими слоями.

Целью данной работы является изучение влияния интерфейсной связи Дзялошинского-Мория на свойства скирмионов. Мы изучаем фазовый переход и конфигурации основного состояния в магнитоэлектрических сверхрешетках, образованных чередующимися антиферромагнитными и сегнетоэлектрическими слоями, с использованием моделирования Монте-Карло и метода наискорейшего спуска. Обнаружено образование стабильного скирмионного кристалла в основном состоянии антиферромагнитных/сегнетоэлектрических сверхрешеток с треугольной решеткой при нулевом внешнем магнитном поле. Очень сильные магнитоэлектрические взаимодействия на границе раздела приводят к исчезновению магнитного фазового перехода. Существование скирмионов на магнито-сегнетоэлектрической поверхности в основном состоянии при нулевом магнитном поле очень интересно и может иметь практическое применение в цифровых технологиях и спинтронике. Обнаружено, что при нулевом приложенном магнитном поле скирмионы в бислое антиферромагнетик/сегнетоэлектрик с треугольной решеткой могут образовываться в диапазоне значений межфазного магнитоэлектрического взаимодействия от 0.85 до 1.95. Результаты проведенного нами моделирования методом Монте-Карло подтверждают, что наблюдаемые скирмионы стабильны до конечной температуры $T = 0.570$ в относительных единицах, приведенных к обменной энергии.

Список публикаций:

[1] Rosh A. // *Nat. Nanotechnol.*, 2017, v. 12, pp. 103-104.

[2] Fert A, Cros V, // *Nat. Nanotechnol.*, 2013, v. 8, pp. 152-156.

[3] Koshibae W, Kaneko Y, Iwasaki J, Kawasaki M, Tokura Y, Nagaosa N. // *Japanese Journal of Applied Physics*, 2015, v. 54, p053001.

3 - Физика полупроводников и диэлектриков

Буглова Яна Олеговна, 2 курс
Воронеж, Воронежский государственный лесотехнический университет имени Г.Ф. Морозова, автомобильный
Фотоэлектрические свойства поверхностно-барьерных структур на основе CdZnS.

Майорова Татьяна Львовна, к.ф.-м.н.
e-mail: iana.sher.03@bk.ru стр. 64

Герасимов Роман Геннадьевич, магистрант 1 года обучения
Томск, Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, радиоинжендерский
Влияние температуры окружающей среды на колориметрические характеристики светодиодной матрицы белого цвета свечения

Солдаткин Василий Сергеевич, к.т.н.
e-mail: roman.gerasimov.1999@list.ru стр. 65

Исламов Дамир Ревинирович, с.н.с.
Новосибирск, Институт физики полупроводников СО РАН, лаб.10
Какие проблемы необходимо решить для производства FRAM на основе оксида гафния
e-mail: damir.islamov@gmail.com стр. 67

Краснова Ирина Андреевна, аспирант 1 года обучения
Новосибирск, Институт физики полупроводников СО РАН
Пассивирующие свойства пленок HfO₂ в зависимости от температуры осаждения на поверхность CdHgTe

Сидоров Георгий Юрьевич, к.ф.-м.н.
e-mail: krasnovaia@isp.nsc.ru стр. 68

Курасова Анна Сергеевна, аспирант 1 года обучения
Томск, Томский государственный университет, радиофизический
Эпитаксиально-диффузионная технология получения компенсированных слоев для лавинных S-диодов

Прудаев Илья Анатольевич, к.ф.-м.н.
e-mail: anuyutakurasova@mail.ru стр. 69

Трофимов Михаил Сергеевич, Магистрант 2 года обучения
Томск, Томский государственный университет, радиофизический
Транспорт неравновесных носителей заряда в детекторных структурах на основе арсенида галлия, компенсированного хромом

Прудаев Илья Анатольевич, к.ф.-м.н.
e-mail: mihant1999@yandex.ru стр. 70

Чехова Анастасия Сергеевна, 1 курс
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
Фазообразование и диэлектрические характеристики твердых растворов на основе Na_{0,5}Bi_{0,5}TiO₃ и Na_{0,5}K_{0,5}NbO₃

Вербенко Илья Александрович, д.ф.-м.н.
e-mail: tchehova.anastasia@yandex.ru стр. 72

Шишкин Максим Александрович, 3 курс
Екатеринбург, Уральский федеральный университет, департамент фундаментальной и прикладной физики
Квантовые интерференционные вклады в проводимость в структурах InGaAs/GaAs

Гудина Светлана Викторовна, к.ф.-м.н.
e-mail: M-a-k-s225@bk.ru стр. 74

Фотоэлектрические свойства поверхностно-барьерных структур на основе CdZnS

Буглова Яна Олеговна

Воронежский государственный лесотехнический университет

Майорова Татьяна Львовна, к.ф.-м.н.

iana.sher.03@bk.ru

В настоящее время большую популярность стали набирать полупроводники на основе наноструктурированных материалов, которые могут быть широко использованы в автомобильном и железнодорожном транспорте, для изготовления твердотельных лазеров, сцилляторов и других элементов оптоэлектроники. Объектом нашего исследования являются твердые растворы CdZnS. Исследуемые структуры являются прямозонным полупроводником, ширина запрещенной зоны варьируется в диапазоне 2,4 – 3,1 эВ в зависимости от соотношения Cd и Zn. При облучении светом проводимость таких материалов увеличивается, что дает возможность использовать их в качестве фоторезистора [1].

Еще одним из преимуществ использования сульфидов кадмия и цинка является многообразие способов получения: химическим осаждением с применением тиокарбамида в качестве источника сульфидных анионов; пульверизацией с последующим пиролизом; методом молекулярно-пучковой эпитаксии, при которой происходит выращивание кристаллов в условиях вакуума; в результате золь-гель процесса; способом ионного распыления; анодированием и электрофорезом; методом трафаретной печати. При этом наиболее перспективным в промышленных масштабах можно считать метод осаждения пленок из раствора, поскольку с точки зрения структурных, электрических и оптических характеристик пленки сульфидов кадмия и цинка, полученные этим методом, не уступают по качеству пленкам, полученным другими методами, а оборудование, которое используется, является более доступным и простым, не требует больших материальных затрат в отличие, например, от методов эпитаксиального осаждения или вакуумного испарения. При этом в зависимости от условий процесса синтеза можно получить поликристаллические или гладкие плотные пленки [2].

В работах [3 – 4] проведен комплекс исследований фотоэлектрических свойств пиролитических пленок CdZnS. Для таких материалов наблюдается ряд особенностей поведения неравновесных носителей заряда. В работе [5] представлена модель, объясняющая эти особенности в рамках поверхностно-барьерного механизма токопереноса. Модель демонстрирует влияние различных параметров на поведение носителей заряда в поверхностно-барьерных структурах и как следствие характер кинетики их фотопроводимости. Поведение носителей заряда существенно сказывается на технические характеристики элементов оптоэлектроники. В связи с этим задача исследования кинетики в частности возбуждения фотопроводимости в поверхностно-барьерных структурах является актуальной.

В данной работе представлены результаты исследования пленочных структур CdZnS, полученных методом пиролиза растворов солей металлов и тиомочевины на нагретую до 400 °С ситалловую подложку. В качестве реагентов применяли соли CdBr₂·2H₂O и ZnBr₂ марки «х.ч.» и тиомочевину N₂H₄CS марки «ос.ч.». Соотношение солей и тиомочевины составляло 1:4.

Измерения фототока проводились при комнатной температуре на установке, регистрирующей токи 10⁻¹¹ А и выше в режиме заданного напряжения 10 В с временным разрешением 5 мкс. Магнетронным напылением на образцы наносились пленочные алюминиевые контакты, ширина щели между контактами составляла 2 мм. Электрический контакт образца с измерительной схемой обеспечивала прижимная пластина, закреплённая на держателе. Темновой ток всех исследуемых структур составлял порядка 0,15 нА. Исследование кинетики фотопроводимости образцов осуществлялось при возбуждении светодиодом HPL-H77V1BA-V2 с длиной волны $\lambda = 380$ нм (3,26 эВ). При этом варьируя ток на светодиоде, его сила света менялась в диапазоне 7 – 10 кд.

Оптическая ширина запрещенной зоны E_g исследуемых пленок определена по краю собственного поглощения из спектральной зависимости $D=f(h\nu)$ (D – оптическая плотность) в допущении прямых разрешенных переходов из спектров поглощения образцов, осажденных на кварце, зарегистрированных на спектрофотометре СФ-2000-02 относительно чистой подложки в диапазоне 190 – 900 нм. Ширина запрещенной зоны пленок Cd_{1-x}Zn_xS при $x = 0$ равна 2,5 эВ, а при $x = 0,5 - 3,1$ эВ [6].

Получена зависимость силы стационарного фототока образцов CdZnS от освещенности (рис.1). Данная зависимость носит нелинейный характер и аппроксимируется степенной функцией с переменным показателем степени. Для пиролитических пленок CdS чистых и легированных щелочными металлами в работах [3, 7] наблюдались аналогичные особенности люксамперных характеристик, которые могут быть объяснены влиянием центров локализации носителей заряда или оптической модуляцией поверхностного потенциального барьера.

В работе [5] в результате моделирования, были получены кривые временной зависимости концентрации свободных носителей заряда, которые согласуются с экспериментальными для пленок CdZnS различного состава. При этом экспериментальным кривым кинетики фототока для структур с большей долей Zn соответствуют кривые, полученные при моделировании с большим значением количества поверхностных центров локализации носителей заряда N_s . Возможно, это говорит о том, что в структурах тройных соединений число поверхностных уровней локализации носителей заряда больше, чем в пленках CdS.

Полученный для пленок CdZnS характер зависимости стационарного фототока от интенсивности фотовозбуждения также подтверждает такое предположение.

Подробно результаты исследования фотопроводимости наноструктурированных пленок CdZnS будут представлены на конференции.

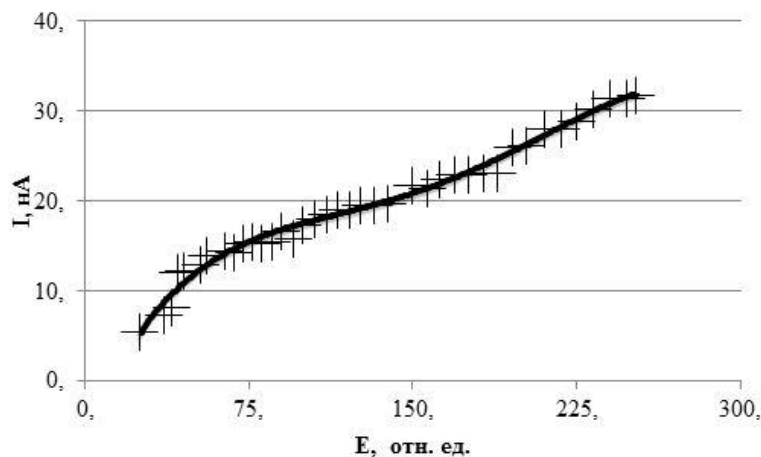


рис.1. Зависимость стационарного фототока пленок CdZnS от освещенности.

Список публикаций:

- [1] Роках А.Г. // *Известия Саратовского университета Нов. Сер. Сер. Физика*. 2015. Т. 15. № 2. С. 53 - 58.
- [2] Гринь Г.И., Козуб П.А., Панчева А.М. // *Восточно-европейский журнал передовых технологий*. 2008. Т. 35. № 5/2. С. 50..
- [3] Mayorova T.L., Klyuev V.G., Zuyagin A.I. // *The European Physical Journal D*. 2017. V. 71. Issue 2, February. article 43, 71: 43
- [4] Майорова Т.Л., Клюев В.Г., Звягин А.И. // *Известия ран. серия физическая*. 2020. Т. 84. № 7. С. 998 – 1003.
- [5] Майорова Т.Л., Клюев В.Г. // *Известия ран. серия физическая*. 2022. Т. 86. № 10. С. 1505 – 1512.
- [6] Nituta A.N., Bezdetko Ju.S., Artyomova E.S., Semenov V.N., Klyuev V.G. // *"From nanostructures, nanomaterials and nanotechnologies to nanoindustry" Proc. of the V Int. Conf. (Izhevsk)*. 2015. P. 78.
- [7] Майорова Т.Л., Клюев В.Г. // *Сборник научных статей по материалам докладов Всероссийской научно-практической конференции «Академические Жуковские чтения», г. Воронеж, 20-21 ноября 201.с.62-67*

Влияние температуры окружающей среды на колориметрические характеристики светодиодной матрицы белого цвета свечения

Герасимов Роман Геннадьевич

Афанасьев Максим Александрович

Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники

Солдаткин Василий Сергеевич

roman.gerasimov.1999@list.ru

Согласно [1], на электростанциях, в котельных (освещённость не менее 100 лк), машинных залах (освещённость не менее 200 лк), электрощитовых внутри здания (освещённость не менее 200 лк) рекомендуется коррелированная цветовая температуры источников света от 4 000 К до 6 500 К. Известно, что светодиодные источники света обладают высокой энергоэффективностью и надёжностью в сравнении с другими искусственными источниками света [2]. Для изготовления промышленных светодиодных светильников применяются светодиоды или светодиодные матрицы белого цвета свечения. Известно [3], что прямое напряжение, освещённость и световая отдача светодиодов снижаются с ростом температуры. Так же с ростом температуры изменяется спектр излучения светодиода, что в свою очередь приводит к изменению колориметрических характеристик. Как правило производители светодиодов не приводят в описании данные по изменению колориметрических характеристик изделий с ростом температуры окружающей среды. А эта информация необходима при проектировании осветительных приборов для электростанций, так как в таких помещениях температуры окружающей среды может быть существенно повышена в связи с производственной

деятельностью. Именно по этой причине исследование влияния температуры окружающей среды на колориметрические характеристики светодиодной матрицы белого цвета свечения является актуальной задачей для разработчиков светодиодных осветительных приборов для электростанций. Целью работы является исследование влияния температуры окружающей среды в диапазоне от 25 °С до 85 °С на колориметрические характеристики (цветовых координат и коррелированной цветовой температуры) светодиодной матрицы белого цвета свечения для промышленных светильников. Задачи исследований: проведение аналитического обзора научной литературы; анализ и выбор методик исследований влияния температуры окружающей среды на светотехнические и колориметрические характеристики светодиодов; проведение экспериментальных исследований по влиянию повышенной температуры окружающей среды на колориметрические характеристики светодиодной матрицы белого цвета свечения.

Известны светодиодные светильники промышленные Diora Craft 150 [4] со световым потоком до 19 000 лм, с потребляемой мощностью 150 Вт, световой отдачей порядка 125 лм/Вт и коррелированной цветовой температурой 4 000 К и 5 000 К. В таких светодиодных светильниках в корпусе-отражателе установлены алюминиевые печатные платы с множеством светодиодов, корпус-отражатель так же является радиатором. В качестве объекта исследований выбраны светодиодные матрицы EPiSTAR XA-20WWJC-10S2P [5]. Значение прямого напряжения в диапазоне 32-34 В, световой поток в диапазоне 2200-2400 лм, коррелированная цветовая температура 3000 К при значении прямого тока 600 мА, индекс цветопередачи не менее 70. Для электропитания и измерений значений прямого тока и напряжения использовался источник-измеритель Keithley 2410, для установки температурного режима использовалась электропечь SNOL 58/350, для измерения колориметрических характеристик использовался спектрометр UPRtek MK350N Premium.

На рис. 1 приведены значения цветовых координат в зависимости от значения температуры окружающей среды.

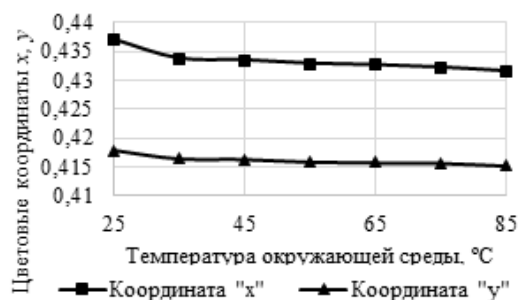


рис.1. Зависимость цветовых координат от температуры окружающей среды

На рис. 2 приведены значения коррелированной цветовой температуры в зависимости от значения температуры окружающей среды.

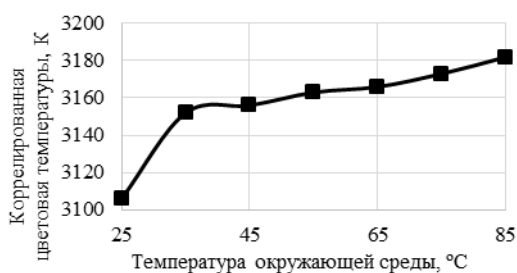


рис.2. Зависимость коррелированной цветовой температуры от температуры окружающей среды

На рис. 3 приведены значения индекса цветопередачи в зависимости от значения температуры окружающей среды.

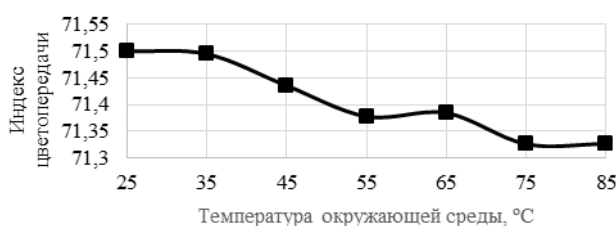


рис.3. Зависимость индекса цветопередачи от температуры окружающей среды

Заключение

В ходе выполнения работы путем проведения эксперимента было исследовано влияние температуры окружающей среды в диапазоне температур от 25 °С до 85 °С на колориметрические характеристики (цветовых координат и коррелированной цветовой температуры) светодиодной матрицы белого цвета свечения для промышленных светильников. Также был проведен аналитический анализ научной литературы, проведён анализ и выбор методик исследований влияния температуры окружающей среды на светотехнические и колориметрические характеристики светодиодов. Установлено, что значения цветовых координат снижаются с ростом температуры окружающей среды при 85 °С x на 0,006, y на 0,002. Значение коррелированной цветовой температуры повышается с ростом температуры окружающей среды при 85 °С на 76 К. Значение индекса цветопередачи снижается с ростом температуры окружающей среды при 85 °С на 0,2. Данные зависимости можно объяснить тем, что оптическая мощность излучения светодиодного кристалла в следствие нагрева снижается и люминофорной композиции становится недостаточно этой оптической мощностью для возбуждения частиц люминофора, что в свою очередь приводит к снижению интенсивности фотолюминесценции.

Список публикаций:

- [1] ГОСТ Р 55710-2013. Освещение рабочих мест внутри зданий. Нормы и методы измерений. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://files.stroyinf.ru/Data/554/55477.pdf> (дата обращения: 15.03.2023).
- [2] Солдаткин В.С. Обзор современных светодиодов: для общего освещения, для садоводческого освещения, УФ-диоды для дезинфекции // Электронные средства и системы управления: матер. докл. междунар. науч.-практ. конф. 2022. № 1. С. 239-241.
- [3] Солдаткин В.С., Афонин К.Н., Каменкова В.С., Ганская Е.С., Туев В.И. Определение температурной зависимости электрических и световых параметров светодиодных элементов в лампе общего назначения // Доклады Томского государственного университета систем управления и радиоэлектроники. 2017. Т. 20, № 3. С. 148-151.
- [4] Официальный сайт АО «Физтех-Энерго». [Электронный ресурс]. – Режим доступа: https://diora.pro/models/diora_craft_11013000_5k/ (дата обращения: 15.03.2023).
- [5] Официальный сайт «Epistar». [Электронный ресурс]. – Режим доступа: www.epistar.com (дата обращения: 15.03.2023).

Какие проблемы необходимо решить для производства FRAM на основе оксида гафния

Исламов Дамир Ревинирович

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

Новосибирский национальный исследовательский государственный университет

damir@isp.nsc.ru

Открытие сегнетоэлектрического эффекта в нанометровых слоях HfO_2 вызвало взрывной интерес к изучению физических свойств этих материалов, в связи с перспективой разработки памяти на основе сегнетоэлектрического переключения (Ferroelectric Random Access Memory, FRAM) терабитного масштаба. Сегнетоэлектрические свойства тонких легированных плёнок HfO_2 были обнаружены в 2007 году научной группой в компании Qimonda совместно с RWTH Aachen при поиске материалов с высокой диэлектрической проницаемостью для использования в конденсаторах ДОЗУ. Авторами была обнаружена ранее не наблюдавшаяся в нормальных условиях нецентросимметричная (полярная) орторомбическая фаза (о-фаза) между моноклинной (m-) и тетрагональной (t-) фазами в легированных слоях HfO_2 толщиной от 5 до 50 нм [1, 2]. Для более толстых плёнок доля m- фазы увеличивается по отношению к о- фазе, что приводит к снижению сегнетоэлектрических свойств. Поляризация плёнки происходит внутри элементарных ячеек о- фазы, перемещая четыре атома кислорода между двумя зеркально-симметричными положениями, определяемыми двумя локальными минимумами, разделёнными энергетическим барьером.

Была выдвинута гипотеза, что факторами, влияющими на образование сегнетоэлектрической фазы, помимо уровня легирования, могут являться: концентрация вакансии кислорода (V_O), механические напряжения, поверхностная и межфазная энергия зёрен. Кроме того, был обнаружен индуцированный полем фазовый переход полярная-неполярная фазы при циклировании [3-6]. При раздельном рассмотрении этих факторов было установлено, что одной из основных причин существования сегнетоэлектрических свойств HfO_2 является легирование. При переборе легирующих примесей выявлено, что окно уровня легирования для формирования сегнетоэлектрической фазы увеличивается с атомным радиусом примеси. До сих пор неясно, что больше влияет на формирование сегнетоэлектрической фазы легированного слоя HfO_2 : ионный радиус примеси или связанная с ней повышенная концентрация V_O в HfO_2 . Для разных концентраций V_O была обнаружена прямая корреляция с долей фазы беспримесного HfO_2 в структуре легированной плёнки [7, 8]. Повышение парциального давления кислорода при PVD-осаждении HfO_2 уменьшает концентрацию V_O , а также долю

сегнетоэлектрической о-фазы с замещением её на неполярную m-фазу. Соответственно, V_0 однозначно стабилизируют сегнетоэлектрические свойства. Было установлено увеличение остаточной поляризации при повышенных механических напряжениях, создаваемых более толстым верхним TiN электродом [9]. Поскольку осаждение верхнего электрода может изменить стехиометрию HfO_2 путём вытягивания O из слоя оксида, эффект механического напряжения также может быть связан с наличием кислородных вакансий.

Проблема нестабильности о-фазы, а значит и сегнетоэлектрического отклика и окна памяти, во время перезаписи информации, является одной из ключевых, которая стоит на пути внедрения FRAM в массовое производство. Для решения этой задачи предлагаются различные методики, такие как вариация примеси легирования и её концентрация [5, 10], подбор металлических электродов [11], а также предварительная подготовка поверхности металла перед осаждением сегнетоэлектрической плёнки [12]. Вариация этих подходов позволяет получить структуры на основе сегнетоэлектрических слоёв HfO_2 , выдерживающих до 10^{12} циклов перезаписи, что, в свою очередь, выдвигает FRAM на роль универсальной памяти.

Список публикаций:

- [1] T. Böске et al., *Appl. Phys. Lett.* 99, 10, 102903 (2011) and 99, 112904 (2011).
- [2] X. Sang et al., *Appl. Phys. Lett.* 106, 162905 (2015).
- [3] M. Pešić et al., *Adv. Funct. Mater.* 26, 4601 (2016).
- [4] E. Grimley et al., *Adv. Electron. Mat.* 2, 1600173 (2016).
- [5] U. Schroeder et al., *Jap. J. of Appl. Phys.* 53, 08LE02 (2014)
- [6] M.H. Park, U. Schroeder, *Root causes for Ferroelectricity in Doped HfO₂ in "Ferroelectricity in Doped HfO₂", Elsevier (2019).*
- [7] A. Pal et al., *Appl. Phys. Lett.* 110, 022903 (2017)
- [8] T. Mittmann et al., *Adv. Mater. Interfaces* 6, 1900042 (2019).
- [9] S. Kim et al., *Appl. Phys. Lett.* 111, 242901 (2017).
- [10] T.M. Zalyalov, D.R. Islamov, 2022 *IEEE 23rd International Conference of Young Professionals in Electron Devices and Materials (EDM)*, 48.
- [11] D. Islamov, T. Zalyalov, (under review).
- [12] S. Shi et al., *Nature Comm.* (under review).

Пассивирующие свойства пленок HfO_2 в зависимости от температуры осаждения на поверхность CdHgTe

Краснова Ирина Андреевна

Гориков Дмитрий Витальевич

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

Сидоров Георгий Юрьевич, к.ф.-м.н.

krasnovaia@isp.nsc.ru

Твердый раствор кадмий-ртуть-теллур CdHgTe (КРТ) широко применяется в науке и технике при исследовании топологических изоляторов, двумерного электронного газа, создании фотоприемных матриц ИК области спектра. Для любого применения необходимо пассивирующее покрытие. Известно [1], что оксид алюминия (Al_2O_3), выращенный методом плазменно-стимулированного атомно-слоевого осаждения (ПАСО) при 120°C , является хорошим пассивирующим покрытием для КРТ. Но в литературе по пассивации узкозонных полупроводников группы A_3B_5 показано, что диэлектрик HfO_2 обладает лучшими пассивирующими свойствами, чем Al_2O_3 . Стандартное температурное окно осаждения HfO_2 , при котором скорость роста за один цикл не зависит от температуры, лежит в диапазоне $160\text{--}340^\circ\text{C}$ и превышает допустимую для КРТ температуру нагрева в вакууме [2]. Однако, в литературе [3] показана возможность роста HfO_2 при более низких температурах, что позволяет использовать HfO_2 для пассивации поверхности КРТ. Но для этого необходимо подобрать оптимальную температуру роста HfO_2 . Таким образом, целью работы является определение оптимальной температуры нанесения на КРТ HfO_2 , методом ПАСО.

Эксперименты проводились на образцах КРТ р-типа, выращенных методом молекулярно-лучевой эпитаксии, с молярным составом $\text{Cd } x=0.22$. Образцы представляют собой кусочки одной пластины. Это позволило минимизировать разброс объемных параметров образцов (таких как состав, концентрация дефектов) с точностью до неоднородности пленки КРТ по площади пластины. Диэлектрик HfO_2 наносился методом ПАСО в камере FlexAl (Oxford Instruments). В качестве прекурсора использовался тетракис(этилметиламин) гафния (ТЕМАН), в качестве окислителя – удаленная кислородная плазма. Температуры роста составляли $80, 100, 120, 140$ и 160°C . Количество циклов нанесения HfO_2 на всех образцах было одинаковым и составляло 200. Затем на полученных образцах изготавливались МДП-структуры, на которых измерялись вольт-фарадные характеристики (ВФХ) при температуре жидкого азота 77K . Измерения ВФХ осуществлялись при помощи прибора B1500A фирмы Agilent. Из измеренных ВФХ определились ёмкость диэлектрика, смещение положения

плоских зон, изменение положения плоских зон при измерении в прямом (от отрицательных до положительных напряжений) и обратном направлениях (от положительных до отрицательных напряжений).

В области большого отрицательного напряжения (-3В) измеренная ёмкость становится постоянной. Это напряжение соответствует режиму сильного обогащения, значит, измеренная ёмкость равна ёмкости диэлектрика. Из измеренных данных наблюдается увеличение ёмкости диэлектрика при увеличении температуры роста HfO_2 . Данное различие связано с различием толщины пленок и величины диэлектрической проницаемости в HfO_2 . Наблюдаемая зависимость ёмкости диэлектрика от температуры роста схожа с зависимостью для пленок Al_2O_3 [1]. Наибольший разброс ёмкости диэлектрика наблюдается у образца, выращенного при 100°C . При увеличении температуры нанесения диэлектрика наблюдается уменьшение разброса ёмкости. Данный разброс может обуславливаться неоднородностью диэлектрической проницаемости и/или неоднородностью структуры пленки HfO_2 .

У ВФХ, измеренных в прямом и обратном направлении, наблюдается разница в положении напряжения плоских зон («гистерезис» ВФХ). Такое поведение связано с зарядкой медленных ловушек на границе раздела. На всех образцах наблюдалось увеличение «гистерезиса» ВФХ при увеличении диапазона напряжений. Наибольшая разница в положении напряжения плоских зон для прямой (от -3В до $+3\text{В}$) и обратной (от $+3\text{В}$ до -3В) развертки наблюдается у образца, на котором HfO_2 наносился при 160°C . У остальных образцов ширина «гистерезиса» близка в пределах разброса. Также при увеличении диапазона напряжений наблюдалось увеличение ёмкости в минимуме ВФХ, свидетельствующее об ионизации дефектов акцепторного типа вблизи границы раздела CdHgTe/HfO_2 . При отрицательном напряжении электроны с дефектных центров в переходном слое захватываются акцепторными состояниями, и происходит ионизация акцепторов.

На всех образцах наблюдается влияние встроенного заряда в диэлектрик, который приводит к смещению ВФХ как целого вдоль оси напряжений. О величине встроенного заряда можно судить по смещению положения плоских зон. Но как было сказано выше, на положение плоских зон также влияет заряд, захваченный медленными ловушками на границе раздела. Для минимизации влияния медленных состояний рассматривались ВФХ, измеренные в обратном направлении. Наблюдается, что при увеличении температуры нанесения HfO_2 уменьшается смещение положения плоских зон, свидетельствующее об уменьшении встроенного заряда в диэлектрик. Наибольшее смещение положения плоских зон наблюдается у образцов, на которых диэлектрик наносился при 80 и 140°C . Наименьшее смещение положения плоских зон наблюдается у образца, на котором HfO_2 наносился при 160°C . Наименьший разброс смещения положения плоских зон наблюдается у образца с температурой роста диэлектрика 160°C . Наибольшая ширина ВФХ наблюдается у образца, на котором HfO_2 наносился при 160°C . Это может свидетельствовать о наибольшей плотности поверхностных состояний. А наименьшая ширина ВФХ наблюдается у образца с температурой роста HfO_2 140°C .

Из рассмотренных параметров установлено, что оптимальное значение температуры нанесения HfO_2 на КРТ, методом плазменно-стимулированного атомно-слоевого осаждения, лежит в диапазоне $120\text{-}140^\circ\text{C}$.

Список публикаций:

- [1] Gorshkov D. V., et al. // *Tech. Phys. Lett.* 2020. Vol. 46, No. 8, PP. 741–744.
- [2] Zakirov E. R., et al. // *Semicond. Sci. Technol.* 2019. Vol. 34, P. 065007.
- [3] Горшков Д. В., и др. // *Письма в ЖТФ.* 2022. Т. 48, №19. С. 16.

Эпитаксиально-диффузионная технология получения компенсированных слоев для лавинных S-диодов

Курасова Анна Сергеевна

Томский государственный университет

Прудаев Илья Анатольевич, к.ф.-м.н.

anyutakurasova@mail.ru

Лавинный S-диод – полупроводниковый прибор, на вольт-амперной характеристике которого имеется участок с отрицательным дифференциальным сопротивлением S-типа. В настоящее время наиболее перспективными применениями S-диодов являются компактные генераторы коротких импульсов для оптических дальнометров, сверхширокополосных радаров и лидаров. S-диод содержит глубокую примесь (Fe, Cr), которая вводится для увеличения динамического напряжения его переключения. В данной работе представлены результаты разработки и исследования эпитаксиально-диффузионной технологии изготовления структур для лавинных S-диодов. Целью исследования является определение оптимальной конструкции активной области прибора и определение условий ее изготовления.

Структуры получали в две стадии. Вначале проводили рост эпитаксиальных слоев n-GaAs хлорид-гидридным методом из газовой фазы. Рост проводился на подложках АГЧТ с направлением (100), в качестве легирующей примеси использовалась сера. В ходе роста формировались профили легирования (рис.1).

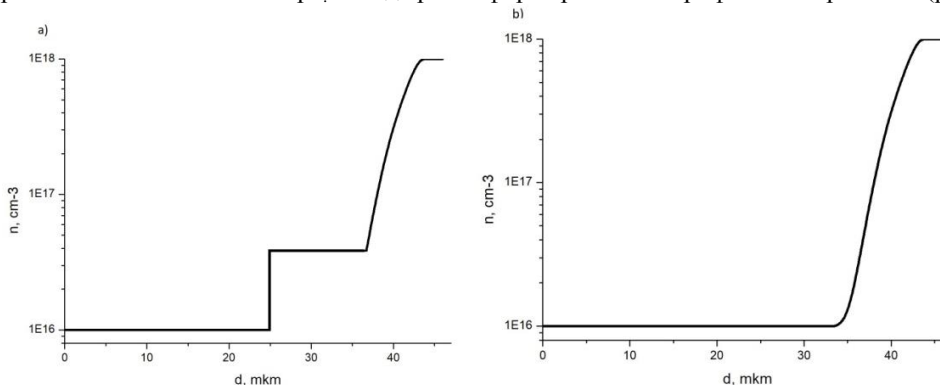


рис.1. Профили легирования: а) первый тип структур б) второй тип структур

На второй стадии проводилась диффузия Fe в «открытой» системе в потоке аргона. Эффективные профили (рис.2) электронов, измеренные с помощью электролитического профилометра «Бриг» на частотах 10 кГц и 500 кГц после диффузионного отжига эпитаксиальных структур. Результаты технологических экспериментов показали, что диффузия в структуры первого типа позволяет, воспроизводимо изготавливать лавинные S-диоды, имеющие в составе активной области слои n- и p-типа проводимости (рис.2, а). Высокие коэффициенты диффузии железа не позволяют контролируемо изготавливать подобные S-диоды из структур второго типа, активная область содержит один слой p-типа проводимости (рис.2, б).

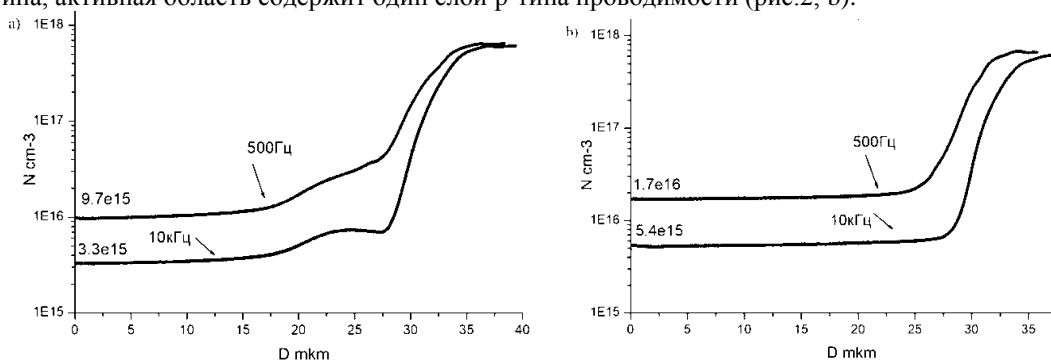


рис.2. Профили легирования: а) первый тип структур б) второй тип структур

Предварительные результаты исследования вольт-амперных характеристик лавинных S-диодов показали, что для обоих типов структур наблюдается участок отрицательного дифференциального сопротивления S-типа. При этом статическое напряжение переключения составляет 40-60 В. Измерения характеристик в схеме генерации импульсов тока (более 10 А) показали, что S-диоды, изготовленные из структур второго типа, проявляют работоспособность лишь при низких частотах переключения. Для них, повышение частоты приводит к исчезновению генерации. Максимальные частоты переключения структур первого типа превышают 200кГц.

Транспорт неравновесных носителей заряда в детекторных структурах на основе арсенида галлия, компенсированного хромом

Трофимов Михаил Сергеевич

Щербаков Иван Дмитриевич

Национальный исследовательский Томский государственный университет

Прудаев Илья Анатольевич к.ф.-м.н.

mihant1999@yandex.ru

В настоящее время арсенид галлия, компенсированный хромом (HR-GaAs:Cr, где HR-high resistivity), широко используется для производства детекторов ионизирующих излучений. Высокотемпературное диффузионное легирование арсенида галлия глубоким акцептором (хромом) позволяет получать полуизолирующий материал с удельным сопротивлением порядка $10^9 \text{ Ом} \times \text{см}$, в результате чего детекторы на

его основе обладают высоким соотношением сигнал-шум. По сравнению с кремниевыми детекторами, детекторы на основе компенсированного арсенида галлия обладают существенно лучшей эффективностью регистрации гамма-квантов в диапазоне энергий (15-60) кэВ и являются более радиационно-стойкими.

Одним из важнейших электрофизических параметров полупроводниковых материалов, определяющих быстродействие приборов микроэлектроники, в том числе и полупроводниковых детекторов ионизирующих излучений, является дрейфовая подвижность носителей заряда. На сегодняшний день известно два основных экспериментальных метода, позволяющих её рассчитать: метод переходного тока (в зарубежной литературе именуемый, как “Transient current technique”), который был разработан сравнительно недавно и метод Ван дер Пау, применяемый для измерения физических параметров полупроводников ещё с начала 60-х годов.

Ранее считалась, что результаты подвижности, полученные ТСТ-методом, являются наиболее достоверными и имеют минимальную погрешность, поскольку данный метод относится к прямым. Метод же Ван дер Пау является расчетным и полученные с помощью него результаты дрейфовой подвижности имеют высокую погрешность. Для расчета дрейфовой подвижности в обоих методах пользуются идеализированными приближениями. В методе Ван дер Пау значение холл-фактора берут за единицу, поскольку его расчет аналитическим путем является затруднительным. В ТСТ-методе для построения зависимости дрейфовой скорости от напряженности электрического поля полагают, что оно распределено однородно по всей структуре.

На рисунке 1 представлены, измеренные нами импульсы напряжения, образованные в результате облучения HR-GaAs:Cr детектора инфракрасным излучением с длиной волны 830 нм. Анализ данных импульсов показывает, что их форма существенно отличается от идеальной (прямоугольной). Кроме того, амплитуды импульсов имеют близкие значения, что абсолютно противоречит выражению для плотности тока, согласно которому, она пропорциональна концентрациям носителей заряда и их дрейфовым скоростям. При одинаковых концентрациях фотоносителей (генерация происходила по типу “зона-зона”) плотности тока, соответственно и амплитуды импульсов, должны различаться во столько, во сколько различаются дрейфовые скорости носителей заряда (в исследуемом нами материале они различаются, примерно в 15 раз). Поскольку дрейфовая скорость пропорциональна подвижности и напряженности электрического поля, то это указывает на сложный вид распределения поля вблизи облученного контакта.

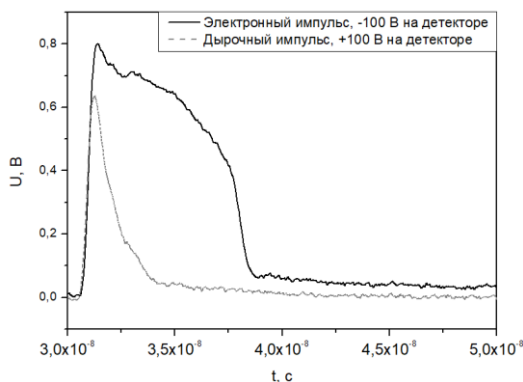


рис.1 Электронный и дырочный импульсы HR-GaAs:Cr - детектора;

В данной работе было проведено численное моделирование импульсных характеристик детектора в среде приборно-технологического проектирования TCAD Sentaurus. В ходе проведения моделирования решалась система дифференциальных уравнений во временной области, состоящая из уравнений непрерывности, Пуассона и Кирхгофа. В качестве модели переноса тока использовалась диффузионно-дрейфовая модель. Рекомбинация носителей заряда описывалась при помощи модели Шокли-Рида-Холла. Моделируемая электрическая цепь детектора состояла из последовательно включенного источника питания постоянного тока, детекторной HR-GaAs:Cr структуры с барьерными металлическими контактами, разделительной емкостью номиналом 200 пФ и сопротивления нагрузки номиналом 50 Ом, являющимся входным сопротивлением усилителя в эксперименте.

На рис.2а представлены расчетные импульсы HR-GaAs:Cr детектора при напряжении $\pm 100 В$. Видно, что характер изменения импульсов во времени, их длительность и амплитуда с высокой точностью согласуется с экспериментом. На рис.2б представлены профили напряженности электрического поля в HR-GaAs:Cr структуре при различном расстоянии от металлических контактов. Наблюдается неоднородный характер распределения поля по всей толщине активной области структуры. Причем чем ближе точка поглощения излучения к контакту, тем меньшую подвижность имеют носители заряда на начальном участке дрейфа, поскольку в данном материале при полях более 5 кВ/см наблюдается участок отрицательно дифференциальной проводимости.

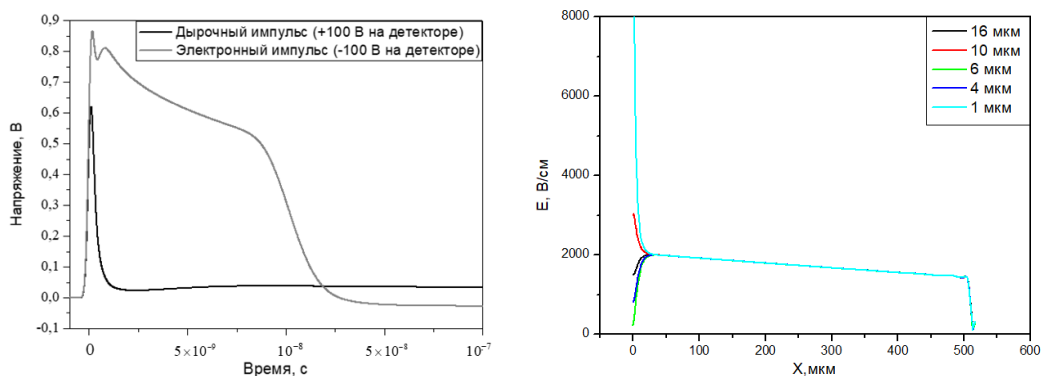


рис.2 а) Расчетные импульсы детектора; б) Профили напряженности электрического поля в HR-GaAs:Cr структуре при различном расстоянии от боковых контактов

Таким образом, при помощи численного моделирования в среде приборно-технологического проектирования TCAD Sentaurus было показано, что для определения физических параметров полупроводника, в частности дрейфовой подвижности, недостаточно пользоваться идеализированным аналитическим приближением, требуется численный расчёт. По результатам численных расчетов было показано, что поле в исследуемых HR-GaAs:Cr структурах распределено неоднородно, из чего следует изменчивость подвижности носителей заряда в процессе дрейфа. Подвижность электронов при их дрейфе от катода к аноду может варьироваться в пределах (400 – 4000) см²/(В⁻¹ × с⁻¹), подвижность же дырок меняется в пределах (40 – 320) см²/(В⁻¹ × с⁻¹). Так же в ходе расчетов было установлено, что всплеск амплитуды напряжения при регистрации дырочных импульсов связан с приповерхностным дрейфом электронов к контактам, что в корне меняет ранее установившееся представление о принципе регистрации дырочной компоненты ТСТ-методом.

Фазообразование и диэлектрические характеристики твердых растворов на основе

Na_{0.5}Bi_{0.5}TiO₃ и Na_{0.5}K_{0.5}NbO₃

Чехова Анастасия Сергеевна

Глазунова Екатерина Викторовна

Южный федеральный университет

Вербенко Илья Александрович, д.ф.-м.н.

tchehova.anastasia@yandex.ru

Введение

Для материаловедения, химии и физики перспективными являются материалы, обладающие сегнетоэлектрическими свойствами. Стремительное развитие электроники привело к тому, что в современных технологиях востребованы диэлектрики с большой плотностью накопления энергии, низкими потерями и хорошей температурной стабильностью. Поэтому материалы с высокой поляризацией, меньшей остаточной поляризацией и более высоким электрическим полем пробоя стали надежными кандидатами для применения в новой технике [1]. Также существует потребность в создании материалов, способных работать при повышенных температурах. По этой причине популярностью пользуются вещества на основе системы цирконата-титаната свинца (ЦТС). ЦТС обладает отличными электрофизическими параметрами, а модификация путем легирования помогает изменять свойства материала в зависимости от потребностей и области применения. ЦТС-19 считается высокотехнологичным, характеризуется средними значениями диэлектрических и пьезоэлектрических характеристик, высокой температурой Кюри и широким диапазоном рабочих температур (~до 150 °С) [2].

Одним из главных недостатков свинец-содержащих материалов является их неэкологичность и токсичность. Поэтому интересующим многих ученых направлением является создание бессвинцовых аналогов ЦТС-материалов, которые не будут наносить вред окружающему миру и экологии в целом.

Наибольший интерес представляют материалы, обладающие высокой диэлектрической проницаемостью и повышенной прочностью на пробой. С этой целью активно используются керамические конденсаторы на основе титанатов и ниобатов щелочных и щелочноземельных металлов [3].

В связи с этим целью работы является установление закономерностей между фазообразованием, структурой и диэлектрическими свойствами твердых растворов (ТР) системы на основе Na_{0.5}Bi_{0.5}TiO₃ и Na_{0.5}K_{0.5}NbO₃.

Объекты и методы исследования

Объектами исследования стали ТР системы $(1-x)\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3-x\text{Na}_{0.5}\text{K}_{0.5}\text{NbO}_3$, где $x=0.00; 0.10; 0.50; 0.90$. Данные ТР получали путем двухстадийного твердофазного синтеза из следующего исходного сырья: NaHCO_3 , Bi_2O_3 , TiO_2 , Nb_2O_5 . Синтез сопровождался выбором оптимальных технологических режимов. Для данной задачи изготавливали серию экспериментальных образцов, а главными критериями для установления оптимальных условий синтеза и спекания были результаты рентгенофазового анализа (РФА) и значения относительной плотности образцов ($\rho_{\text{отн}}$). Установлено, что получение необходимых составов возможно при: $T_{\text{синт1}}=(850-950)^\circ\text{C}$, $T_{\text{синт2}}=(850-970)^\circ\text{C}$. $\tau_{\text{синт1}}=\tau_{\text{синт2}}=4$ часа. $T_{\text{сп}} = (1125-1150)^\circ\text{C}$, $\tau_{\text{сп}} = 2$ часа. Точные значения температур и времени синтеза и спекания зависят от состава ТР. Механическую активацию (МА) синтезированных компонентов проводили на этапе получения пресс-порошков, предназначенных для спекания. МА выполняли в шаровой планетарной мельнице АГО-2 в этиловом спирте 20 минут при частоте вращения 1820 оборотов в минуту. Полученные составы исследовали с помощью РФА на дифрактометре ДРОН 3.0 (СоКа-излучение, фокусировка по Брэггу-Брентано). Петли диэлектрического гистерезиса получали с использованием измерительного стенда, собранного по схеме Сойера-Тауэра, при комнатной температуре, частоте 50 Гц и величине электрического поля $700\div 1900$ В. Диаметр образцов составляет 12 мм при толщине 1-2 мм. Плотность энергии была получена из кривых зависимости поляризации от электрического поля (P-E) путем интегрирования площади между осью поляризации и кривой P-E [4]. С помощью интегрирования были вычислены значения эффективной энергии и КПД.

Плотность энергии W_{eff} рассчитывали по формуле (1).

$$W_{\text{eff}} = \int_{P_r}^{P_{\text{max}}} E dP, \quad (1)$$

где P_{max} – значение поляризации при максимуме E , P_r – значение при $E = 0$.

Экспериментальные результаты

Рентгенофазовый анализ показал, что ТР системы $(1-x)\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3-x\text{Na}_{0.5}\text{K}_{0.5}\text{NbO}_3$ не содержат примесей. $\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}$ имеет ромбоэдрическую симметрию, судя по дифрактограмме, а при введении 10% $\text{Na}_{0.5}\text{K}_{0.5}\text{NbO}_3$ симметрия системы меняется на кубическую, что сохраняется и на $x=0.5$ (но с возникновением двух кубических фаз).

Эксперимент показал, что в $\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3$ максимальное значение плотности энергии $W_{\text{eff}} = 20.74$ Дж/см³ наблюдается при 1900 В, при этом КПД = 51.88%. При увеличении x до 0.9 КПД и плотность запасенной энергии возрастают: $W_{\text{eff}} = 28,00$ Дж/см³, КПД = 76.68%. На рис.1. представлены петли диэлектрического гистерезиса образца $(1-x)\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3-x\text{Na}_{0.5}\text{K}_{0.5}\text{NbO}_3$ при $x=0.90$. При $x=0.50$ петли диэлектрического гистерезиса получить не удалось, т.к. указанный ТР обладает высокой проводимостью.

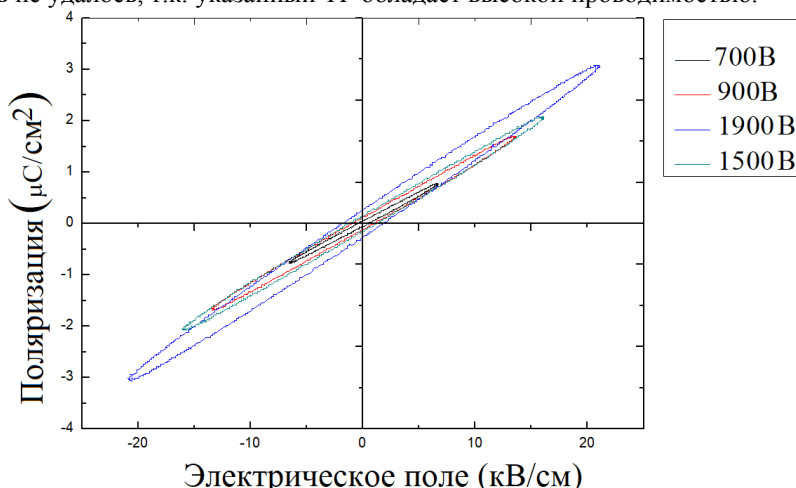


рис.1. Петли диэлектрического гистерезиса образца $(1-x)\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3-x\text{Na}_{0.5}\text{K}_{0.5}\text{NbO}_3$ при различных значениях напряжения

Выводы

В работе были получены беспримесные ТР системы $(1-x)\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3-x\text{Na}_{0.5}\text{K}_{0.5}\text{NbO}_3$ с ожидаемыми показателями относительной плотности: $\rho_{\text{отн}}(\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3) = 96\%$, $\rho_{\text{отн}}(\text{Na}_{0.5}\text{K}_{0.5}\text{NbO}_3) = 84\%$. Установлено, что наивысшее значение плотности энергии среди полученных показывает ТР с $x=0,9$ при 1900 В, КПД при этом имеет достаточно высокое значение – 76.68%. Экспериментальные данные показали, что при увеличении значения x КПД и плотность энергии ТР возрастают.

Данные будут использованы при разработке новых сегнетоэлектрических материалов для устройств накопления энергии.

Выражаем благодарность за помощь в проведении исследовательской работы с.н.с. Шилкиной Л.А.

«Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности 2023 г.). Проект № FENW-2023-0010/(Г30110/23-11-ИФ)» при использовании оборудования ЦКП НИИ физики ЮФУ.

Список публикаций:

[1] Xihong H. A review on the dielectric materials for high energy-storage application // Journal Article, 2013

[2] Малыхин А. Ю., Скрылёв А. В., Панич А. Е., Свирская С. Н., Кротова Е. И., Медведева Е. С. / Пути оптимизации свойств пьезокерамического материала ЦТС-19 // Известия ЮФУ. Технические науки. 2014. №4 (153).

[3] J.C. Niepce, D. Hugentobler // Concise Encyclopedia of Advanced Ceramic Materials. 1991.

[4] M.-H. Zhang, L. Fulanović, C. Zhao, J. Koruza / Review on field-induced phase transitions in lead-free NaNbO_3 -based antiferroelectric perovskite oxides for energy storage // Journal of Materiomics, V. 9, Issue 1, 2023, P. 1-18.

Квантовые интерференционные вклады в проводимость в структурах InGaAs/GaAs

Шишкин Максим Александрович¹

С.В. Гудина², В.Н. Неверов²

¹Уральский федеральный университет

²Институт физики металлов им. М.Н. Михеева Уро РАН

m-a-k-s225@bk.ru

Существующие квантовые интерференционные поправки к проводимости от невзаимодействующих электронов (эффекты слабой локализации, $\Delta\sigma^{\text{WL}}$) и за счет модифицированного беспорядком электрон-электронного взаимодействия, $\Delta\sigma^{\text{ee}}$, можно выделить, благодаря их зависимости от температуры T , и магнитного поля, B . Разные виды функциональной зависимости проявляются в зависимости от степени беспорядка: разделяются предел чистого металла или рассеяние на одиночной примеси (баллистический режим $k_B T \tau / \hbar > 1$, где k_B – постоянная Больцмана, τ – время свободного пробега электрона, \hbar – постоянная Планка) и «грязный» предел, где проявляется логарифмическая зависимость от температуры (диффузионный режим $k_B T \tau / \hbar \ll 1$).

Кроме того, чтобы разделить вклады от этих эффектов необходимо приложить магнитное поле, т.к. характеристический интервал магнитных полей B является разным у каждого вклада. Поле $B_\phi = \hbar(4eD\tau_\phi)^{-1}$ (D – коэффициент диффузии, e – заряд электрона) является характеристикой эффекта слабой локализации и определяется временем сбоя фазы электронной волны τ_ϕ .

Исследованы квантовые интерференционные вклады в проводимость структур с квантовыми ямами InGaAs/GaAs в широком интервале температур в диффузионном и баллистическом режимах.

Приложение магнитного поля $B > B_\phi$, когда вклад от слабой локализации уже подавлен, позволило рассматривать исключительно вклад от электрон-электронного взаимодействия. Построение температурной зависимости σ_{xx} при $B = 0$ позволило судить о присутствии вкладов квантовых поправок. Анализ зависимости сопротивления ρ_{xx} от B^2 при фиксированных температурах показал расхождение с теорией, утверждающей существование точки, сопротивление в которой не зависит от температуры. Причины расхождения рассматриваются.

4 - Физика атомного ядра и элементарных частиц. Физика высоких энергий

Антохина Ксения Витальевна, 4 курс

Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический

Черенковское излучение в мишенях с нарушенной азимутальной симметрией

Мальшевский Вячеслав Сергеевич, д.ф.-м.н.

e-mail: kantohina@sfedu.ru стр. 76

Веретенников Дмитрий Геннадьевич, 4 курс

Томск, Томский политехнический университет, инженерная школа ядерных технологий

Радиационные характеристики нейтронного излучения модифицированного ядерного топлива реактора типа ВВЭР

Беденко Сергей Владимирович, к.ф.-м.н.

e-mail: dgv3@tpu.ru стр. 77

Гладких Михаил Викторович, магистрант 2 года обучения

Томск, Томский политехнический университет, инженерная школа ядерных технологий

Исследование зависимости спектра нейтронов от параметра пучка дейтронов при реакции ${}^9_4\text{Be} (d,n) {}^{10}_5\text{B}$ на ускорителе Р-7М

Наймушин Артем Георгиевич, к.ф.-м.н.

e-mail: mvg23@tpu.ru стр. 78

Папазян Дмитрий Артурович, 4 курс

Ростов-На-Дону, Южный федеральный университет, физический

Переходное излучение релятивистского иона в мишени конечной толщины

Мальшевский Вячеслав Сергеевич, д.ф.-м.н.

e-mail: dpaapazyan@sfedu.ru стр. 79

Черенковское излучение в мишенях с нарушенной азимутальной симметрией

Антохина Ксения Витальевна

Южный федеральный университет

Мальшевский Вячеслав Сергеевич, д.ф.-м.н.

kurlbik753@gmail.com

Впервые излучение Вавилова-Черенкова было обнаружено учеными ещё в 1934 году. Но до сих пор многие свойства этого излучения не были изучены. На движение частицы внутри твердой мишени влияют множество факторов, такие как: многократное столкновение с атомами мишени, ориентация кристалла, обуславливающая влияние эффекта каналирования [1,2]. Данная работа посвящена теоретическому исследованию углового распределения интенсивности излучения Вавилова-Черенкова в мишенях с нарушенной азимутальной симметрией. В качестве мишени был выбран кристалл плавленного кварца толщиной 100 длин волн (длина волны выбрана 0.14 мкм). Дисперсионные свойства этого вещества хорошо изучены (см., например, [3]).

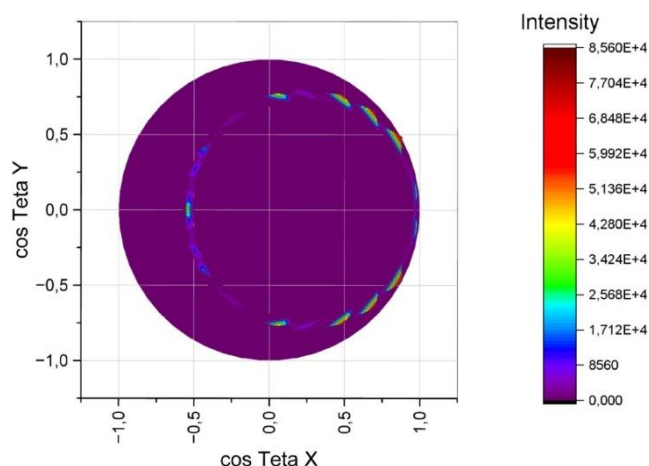


рис. 1. Угловое распределение Черенковского излучения частиц со скоростью $0.8c$ в плавленном кварце. Угол поворота мишени относительно направления движения частиц 10 градусов.

На рисунке 1, видно, что в случае Черенковского излучения, проходящего через мишень с нарушенной азимутальной симметрией, наблюдается специфическая интерференционная картина по азимутальному углу. На диаграмме (рис.1) заданы такие параметры, что можно наблюдать полное кольцо Черенковского излучения. Физическая причина такого явления состоит в следующем. Хорошо известно, что при нормальном падении на поверхность мишени конечной толщины угловое распределение излучения Вавилова-Черенкова имеет вид концентрических колец. Эти осцилляции по полярному углу объясняются интерференцией волн, распространяющихся в направлении движения частицы и отраженных от границ мишени. При косом влете частиц в мишень угловое распределение становится несимметричным, что ранее было установлено в ряде работ (см., например, [1]). Кроме того, при влете в мишень под некоторым углом эффективная толщина мишени увеличивается, что уменьшает угловую ширину Черенковских колец. При этом, в отличие от нормального падения, эффективная толщина для разных направлений излучения в Черенковском конусе начинает зависеть от азимутального угла. Последнее обстоятельство приводит к тому, что фазы отраженных от границ мишени волн теперь не постоянны, а также начинают зависеть от азимутального угла. Таким образом, нарушение азимутальной симметрии приведет к дополнительным интерференционным осцилляциям и по азимутальному углу. Угловое распределение в этом случае приобретет довольно сложный вид и наиболее ярко проявляется в тонких мишенях. Такое перераспределение спектрально-угловой плотности излучения, существенно увеличивает его выход в некоторых узких угловых интервалах и может иметь важные практические применения, в частности, для контроля угловой расходимости пучков ускоренных частиц.

Список публикаций:

- [1] Takabayashi Y., Fiks E. I., Pivovarov Y. L. First studies of 500-nm Cherenkov radiation from 255-MeV electrons in a diamond crystal // *Physics Letters A*. – 2015. – Т. 379. – №. 14-15. – С. 1032-1035.
- [2] Жеваго Н. К., Глебов В. И. КАНАЛИРОВАНИЕ И ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ РЕЛЯТИВИСТСКИХ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В МЕТАЛЛООРГАНИЧЕСКИХ КАРКАСНЫХ СТРУКТУРАХ // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. – 2017. – Т. 151. – №. 6. – С. 995-1004.
- [3] Kitamura, R. Optical constants of silica glass from extreme ultraviolet to far infrared at near room temperature / R. Kitamura, L. Pilon, M. Jonasz // *Applied Optics*. – 2007. – V. 46. – No.33. – P. 8118-8133.

Радиационные характеристики нейтронного излучения модифицированного ядерного топлива реактора типа ВВЭР

Веретенников Дмитрий Геннадьевич
Томский политехнический университет
Беденко Сергей Владимирович, к.ф.-м.н.
dgv3@tpu.ru

В реакторах типа ВВЭР в качестве топлива используется UO_2 с обогащением по U^{235} от 3 до 5 %. Основными проблемами применения UO_2 является его сравнительно низкая радиационная и термическая стойкость, ограничивающая производительность и безопасность реактора.

Практическое применение получило модифицированное топливо $UO_2 + 5-8$ масс.% Gd_2O_3 . Проводятся исследования свойств активной зоны, содержащей топливо с AmO_2 в качестве выгорающего поглотителя [1]. Для длительной и эффективной работы реактора топливо легируют различными гомогенными соединениями и гетерогенными включениями. В качестве легирующих добавок также рассматриваются В, Ве, В, С, Mg, Al, Si, Hf, Ег, Ра и др. Эти элементы улучшают радиационную и термическую стойкость топлива, его теплопроводность, теплофизические и нейтронно-физические параметры активной зоны. Например, при добавлении в топливо Ве улучшается его теплопроводность [2]. При введении микродобавок, содержащих Al и Si, увеличиваются размеры зерна плотноспечённого UO_2 и тем самым повышается механическая прочность топливной композиции [3].

Очевидно, что перечисленные элементы обладают рядом преимуществ при их использовании в качестве легирующих добавок, однако некоторые из них являются целевыми для (α, n) -реакции и поэтому могут существенно осложнить радиационную обстановку на стадиях открытого и закрытого ЯТЦ. Кроме того, используемое на практике топливо с Gd_2O_3 имеет сниженное на 20 % значение теплопроводности [3], поэтому ведутся поиски альтернативных выгорающих поглотителей.

Расчёты выходов и спектров (α, n) -нейтронов из элементов малой и средней атомной массы выполнены по программе Sources-4C. В качестве расчётной модели использовалась модель плоскопараллельного моноэнергетического пучка α -частиц, падающего на материал мишени с интенсивностью 10^6 α -частиц/с. Энергия α -частиц принята равной 5,15 МэВ и соответствует средневзвешенной энергии спектра α -частиц ОЯТ реактора ВВЭР-1200 с выгоранием ~ 60 МВт·сут/т(U), выдержкой от года и удельной активностью $2,58 \cdot 10^{15}$ Бк/ТВС. Диапазон рассматриваемых энергий нейтронов обозначен от 0 до 12 МэВ и разделен на 48 равнозначных моноэнергетических групп. Далее демонстрируются результаты расчета по Sources-4C выхода нейтронов (Y_n) и их энергетического распределения для элементов (E_n), которые рассматриваются для применения с целью улучшения свойств топлива и активной зоны реактора типа ВВЭР (рис.1).

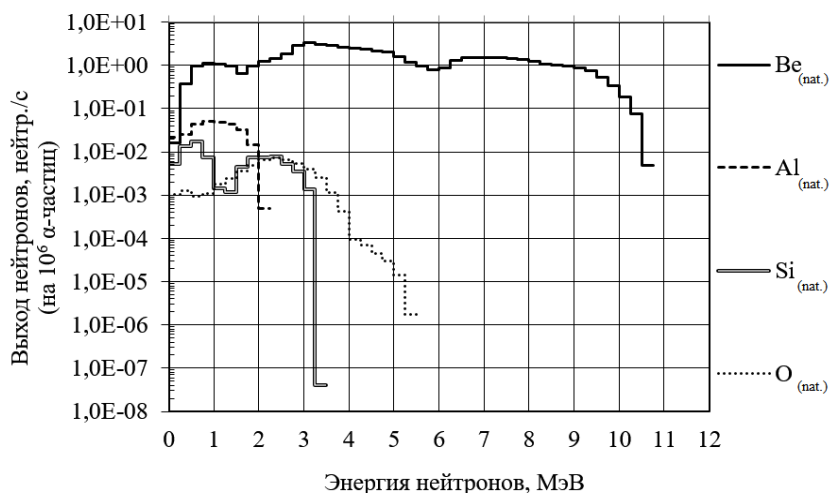


рис.1. Нейтронные спектры целевых для (α, n) -реакции элементов

Анализ результатов показывает наличие значительного выхода (α, n) -нейтронов для Be^9 , Al^{27} , $Si^{29,30}$ в сравнении с $O^{17,18}$ в составе UO_2 . Учитывая, что данные элементы также уменьшают ураноёмкость топливных таблеток и усложняют технологический процесс их изготовления, сделан вывод о нецелесообразности их применения в качестве легирующих добавок.

Состав, активность и источник α -частиц ОЯТ получен по MCNP6.2 и данным авторов [1]. Нейтронно-физический расчёт, расчёт изотопного состава, активности и выдержки ОЯТ выполнены по WIMS-D5B и MCNP6.2 для штатной ТВС ВВЭР-1200 и ТВС, содержащей AmO_2 . Снижение начального k_{eff} с 1,35 до 1,27

говорит об эффективности использования AmO_2 в качестве выгорающего поглотителя в UO_2 . Кроме того, AmO_2 (0,2 ат.%) в гомогенном исполнении не ухудшает теплопроводность топлива, в отличие от Gd_2O_3 [1].

Расчёт нейтронной компоненты излучения ОЯТ выполнен по Sources-4C с использованием гомогенной модели. В данном случае источниками альфа-излучения и нейтронов в результате спонтанного деления являются тяжелые изотопы, составляющие топливо. Материалом мишени являются изотопы O^{17} и O^{18} , являющиеся целевыми для (α, n) -реакции. По полученным данным о нейтронных спектрах рассчитана мощность эквивалентной дозы согласно Рекомендациям МКРЗ 2007 года. Расчёт мощности эквивалентной дозы ($H_{T,R}$) нейтронного излучения ОЯТ после 7 лет выдержки показывает, что при использовании топлива из UO_2 $H_{T,R}$ равна 114,5 мЗв/(ч·ТВС), при введении 0,2 % AmO_2 $H_{T,R}$ увеличивается до 296,1 мЗв/(ч·ТВС).

Результаты расчёта активности и нейтронной составляющей радиационных характеристик ОЯТ показывают, что дозовая нагрузка при использовании топлива с AmO_2 сохраняется в допустимых пределах.

Список публикаций:

[1] Shelley A. Use of americium as a burnable absorber for VVER-1200 reactor / A. Shelley, M. H. Ovi // Nuclear Engineering and Technology. – 2021. – V. 53. – P. 2454-2463.

[2] Савченко А.М. Техно-экономическая оценка (исследование - ТЭИ) Проекта: «Перспективные научно-технические разработки материалов и технологий безопасных твэлов коммерческих водо-водяных реакторов». – 2017. – 41 с.

[3] Теплофизические свойства модифицированного оксидного ядерного топлива / В.Г. Баранов [и др.] // Атомная энергия. – 2011. – Т. 110, вып. 1. – С. 36-40.

Исследование зависимости спектра нейтронов от параметров пучка дейтронов при реакции ${}^9_4\text{Be}(d,n){}^{10}_5\text{B}$ на ускорителе Р-7М

Гладких Михаил Викторович

Овсенёв Александр Евгеньевич, Смольников Никита Викторович, Терещенко Андрей Васильевич
Национальный исследовательский томский политехнический университет

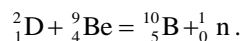
Наймушин Артём Георгиевич, к.ф.-м.н.

mvg23@tpu.ru

Нейтрон-захватная терапия (НЗТ) – один из методов радиационной терапии для селективного лечения злокачественных новообразований головного мозга, шеи, легких и т.д. В основе метода лежит ядерная реакция радиационного захвата нейтрона сильнопоглощающими изотопами (B^{10} , Gd^{157}).

В качестве источников нейтронного излучения для целей НЗТ возможно использование ядерных реакторов, ускорителей, Cf^{252} . Среди упомянутых, наиболее функциональным в качестве источника нейтронов является использование ускорителя благодаря возможности реализации установок с заданными свойствами для исследований НЗТ на базе экспериментальных устройств ускорителя, а также уменьшению дозовых нагрузок на здоровой ткани от гамма-излучения.

В ТПУ в качестве установки по осуществлению НЗТ используется циклотрон Р-7М. Циклотрон Р-7М с диаметром полюсов магнита 1,2 м является прототипом серии циклотронов У-120 и предназначен для ускорения ионов. Главными преимуществами циклотрона Р-7М является возможность ускорения ионов в широком диапазоне масс от протонов с массой 1 до аргона с массой 40 а.е.м. до любой энергии в диапазоне от 0,9 до 6 МэВ/нуклон для легких ионов и 0,65-1,37 МэВ/нуклон для самых тяжелых из указанных ионов. Для дейтронов, на данном ускорителе, максимальный ток пучка достигает 50 мкА, а диапазон энергий пучка от 9 до 14 МэВ. Циклотрон служит источником ускоренных дейтронов для инициирования реакции:



Для определения параметров источника нейтронов сформирована модель и определена зависимость спектра нейтронов от параметров пучка дейтронов. Формирование модели проведено в программе PHITS (Particle and heavy ion transport code system), которая осуществляет моделирование переноса излучения методом Монте-Карло. В результате получены спектры потока нейтронов на расстоянии 1 м от источника в зависимости от энергии пучка дейтронов (рис. 1).

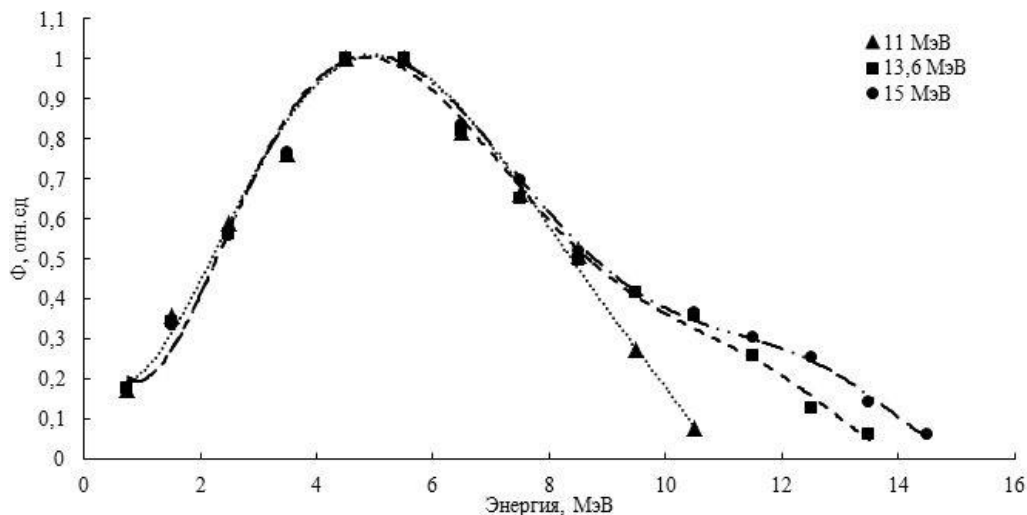


рис. 1. Спектры потока нейтронов при разной энергии пучка дейтронов

В ходе работы установлено, что с увеличением энергии дейтронов наиболее вероятная энергия нейтронов увеличивается с 4,98 МэВ до 6,06 МэВ, а средняя энергия увеличивается с 4,33 МэВ до 5,10 МэВ.

Переходное излучение релятивистских ионов в мишени конечной толщины

Папазян Дмитрий Артурович
Южный федеральный университет
Мальшевский Вячеслав Сергеевич
dparazyan@sfnu.ru

Экспериментальные и теоретические исследования взаимодействия тяжелых ультрарелятивистских ионов с конденсированной средой описывают фундаментальные явления атомных столкновений в твердых телах. Одним из таких явлений, обусловленным движением тяжелых релятивистских ионов в среде, является переходное излучение или Черенковское электромагнитное излучение [1, 2]. Особенности этих процессов с участием релятивистских ионов связаны с возможным изменением зарядового состояния иона при переходе из одной среды в другую. При этом, говоря о переменном заряде, полагаем, что часть заряда системы «ионы + мишень» покидает состояние движения и остается в среде, однако полный заряд всей системы остается неизменным. Настоящая работа посвящена теоретическому исследованию особенностей спектрально-углового распределения электромагнитного излучения многозарядных ионов в тонких мишенях.

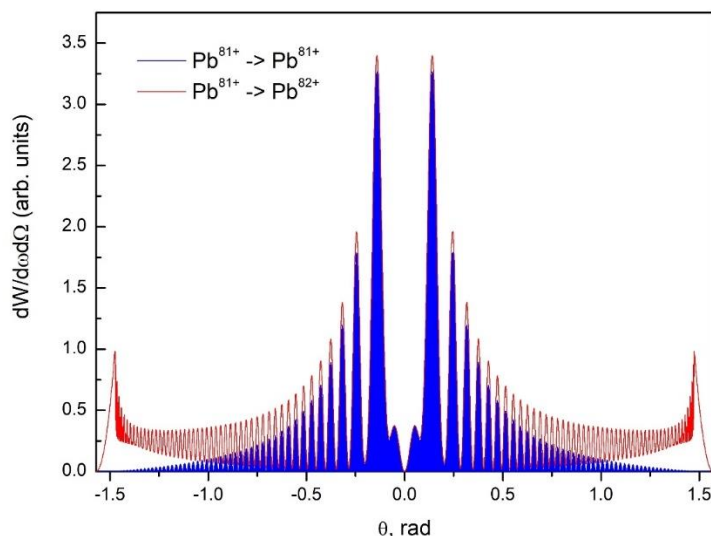


рис.1. Угловое распределение излучения в направлении «назад» релятивистских ионов свинца (Лоренц-фактор $\gamma = 10$), пересекающих тонкую золотую пластину, при различных значениях конечного заряда. Энергия испускаемого кванта $\hbar\omega = 500$ эВ, толщина пластины $L \approx 125$ нм (или пятьдесят длин волн).

Для решения уравнений Максвелла и нахождения электромагнитных полей наличие границ «вакуум-среда» потребует шивки нормальной и тангенциальной составляющих полей на ней. Таким образом, мы получаем систему уравнений для нормальной и тангенциальной составляющих электрических полей. Решения этой системы позволяют рассчитывать спектрально-угловые характеристики излучения (в направлении «вперед» (вдоль направления движения частицы) или в направлении «назад»). Результаты расчетов представлены на рис.1, где энергия излучения дана в относительных единицах $e^2/\pi^2 c$. Энергия испускаемых квантов выбрана в диапазоне вакуумного ультрафиолета ($\hbar\omega = 500$ эВ, данные о дисперсии диэлектрической постоянной взяты из [3]). В этом случае появляются узкие максимумы в угловом распределении излучения в рентгеновском диапазоне частот при углах, близких к $\pi/2$. Причиной появления таких максимумов возможно является эффект полного внешнего отражения виртуальных фотонов от поверхности мишени.

Список публикаций:

- [1] М. М. Л. Тер-Микаелян, *Влияние среды на электромагнитные процессы при высоких энергиях*, Изд-во АН Арм.ССР, Ереван (1969), с. 210.
- [2] Батыгин В. В., Топтыгин И. Н. 3.2. *Кинематика релятивистских частиц // Современная электродинамика, часть 1. Микроскопическая теория.* — Москва-Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2002. — С. 238. — 736 с. — 1000 экз.
- [3] B.L. Henke, E.M. Gullikson, and J.C. Davis. *X-ray interactions: photoabsorption, scattering, transmission, and reflection at E=50-30000 eV, Z=1-92.* // *Atomic Data and Nuclear Data Tables.* — Vol. 54 (no.2). — 181-342 (July 1993).

5 - Электрофизика, электрофизические установки. Физика плазмы, плазменные технологии

Андронов Артем Андреевич, аспирант, инженер
Томск, Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, ФЭТ
Синтез диэлектрических покрытий на основе циркониевой керамики с помощью форвакуумного плазменного источника электронов
Юшков Юрий Георгиевич, д.т.н.
e-mail: artem.andronov.98@bk.ru стр. 83

Андронов Артем Андреевич, аспирант, инженер
Томск, Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, электронной техники
Электронно-лучевой синтез термобарьерных покрытий на основе керамики в форвакуумной области давлений
Юшков Юрий Георгиевич, д.т.н.
e-mail: artem.andronov.98@bk.ru стр. 82

Горьковская Диана Андреевна, 4 курс
Томск, Томский государственный университет, физический
Автоэлектронная эмиссия с шероховатой поверхности
Семенюк Наталья Степановна, к.ф.-м.н.
e-mail: diana191@inbox.ru стр. 85

Долгова Анна Викторовна, магистрант 1 года обучения
Томск, Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, электронной техники
О механизмах перераспределения титана в объеме $ZrO_2 - Ti$ композита при электронно-лучевом спекании
Климов Александр Сергеевич, д.т.н.
e-mail: annedolgova@yandex.ru стр. 86

Кузнецова Анастасия Андреевна, 4 курс
Томск, Томский политехнический университет, инженерная школа ядерных технологий
Плазмохимического синтез оксидных композиций для уран ториевого толерантного ядерного топлива для высокотемпературных газоохлаждаемых реакторов
Каренгин Александр Григорьевич, к.ф.-м.н.
e-mail: aak264@tpu.ru стр. 87

Параскун Александр Григорьевич, 3 курс
Новосибирск, Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, физический
Изготовление трансформатора Тесла на основе фундаментальных физических законов и уравнений Кирхгофа
Пальчиков Евгений Иванович, д.т.н.
e-mail: a.paraskun@g.nsu.ru стр. 89

Фролова Валерия Петровна, н.с.
Томск, Институт сильноточной электроники СО РАН
Магнетрон с нагреваемой в разряде мишенью для формирования многокомпонентных покрытий на основе бора
Юшков Георгий Юрьевич, д.т.н.
e-mail: Frolova_Valeria_90@mail.ru стр. 90

Щербина Данил Сергеевич, 4 курс
Томск, Томский политехнический университет, инженерная школа ядерных технологий
Исследование плазмохимического процесса синтеза топливных оксидных композиций из водно-органических нитратных растворов урана, плутония и магния
Александр Григорьевич Каренгин, к.ф.-м.н.
e-mail: dss44@tpu.ru стр. 92

Электронно-лучевой синтез термобарьерных покрытий на основе керамики в форвакуумной области давлений

Андронов Артем Андреевич

Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники

Юшков Юрий Георгиевич д.т.н.

artem.andronov.98@bk.ru

Жаропрочные сплавы на основе разных материалов широко используются в ракетной, космической и авиационной технике, главным образом в качестве материалов для горячих секций газовых турбин, таких как камера сгорания, а также турбинные лопатки. Наиболее эффективным способом повышения КПД газовой турбины является повышение температуры газа на входе в турбину. Допустимая температура для надежной и продолжительной работы стационарных турбин значительной мощности составляет 1000-1100°C, и она имеет тенденцию к неуклонному повышению [1]. Повышенные рабочие температуры вызывают быстрое окисление поверхности лопаток. Это порождает проблему защиты критически важных деталей от окисления и коррозии путем нанесения защитных покрытий на их поверхности. Необходимость в таких покрытиях возникла в 1950-х годах при производстве авиационных двигателей, когда стало очевидно, что составы материалов, требуемые для повышения прочности при высоких температурах, несовместимы с составами, необходимыми для достижения оптимальной степени защиты от воздействия высокотемпературной агрессивной окружающей атмосферы. Среди многих требований, предъявляемых к высокотемпературным секциям турбин, выделяются устойчивость к абразивному износу, коррозии, а также соответствующий уровень механических свойств. Анализ лучших отечественных и зарубежных покрытий показывает, что пока не существует материала, который мог бы гарантировать надежную работу лопастей турбин в течение длительного времени при высоких нагрузках и температурах. По этой причине продолжается постоянный поиск новых составов покрытий, устойчивых к длительному высокотемпературному окислению и сульфидно-ванадиевой коррозии. Следует отметить, что в промышленно развитых странах высокий приоритет отдается разработке новых материалов для нанесения покрытий и методов их нанесения. Основными материалами для нанесения таких покрытий служат высокотемпературные керамики на основе оксида алюминия (Al_2O_3) и циркония (ZrO_2). Современные способы нанесения таких покрытий обеспечивают приемлемое качество покрытий, однако существуют проблемы с получением покрытий толщинами больше 10 мкм и скоростями их нанесения. Одним из альтернативных методов получения покрытий с нужными характеристиками является метод электронно-лучевого синтеза таких покрытий [2].

Эксперименты проводились на стенде, оснащенном форвакуумным плазменным источником электронов на основе эмиссии электронов из плазмы тлеющего разряда, функционирующего в непрерывном режиме в диапазоне давлений 1–100 Па [3].

Нанесение керамических покрытий проходило следующим образом. Сначала электронный пучок при давлении 5 Па нагревал мишень из алюмооксидной керамики в течение 5 мин. Затем с помощью магнитной фокусирующей системы пучок фокусировался и нацеливался на образец из фрагмента керамики, обеспечивая, таким образом, испарение образца, пары испаренного материала осаждались на подложки и формировали тем самым покрытие на основе керамики. Такая же процедура проводилась с образцом из оксида циркония ZrO_2 .

Далее для определения тепловой стойкости оба образца подвергались нагреву. Температура поверхности образца с покрытием контролировалась оптическим пирометром Raytek серии Marathon MM. На рисунке 1 приведен график, показывающий результаты этого эксперимента.

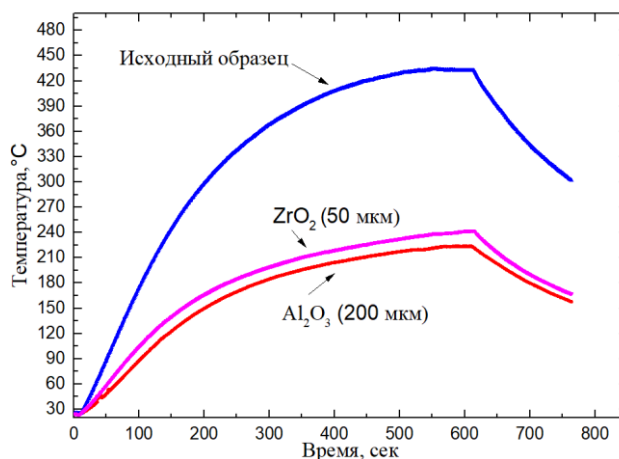


рис. 1 – зависимость температуры нагрева от времени

На рисунке 1 представлены 3 кривые, соответствующие трем различным образцам. Как видно, при одинаковом времени нагрева (615 с) температура исходного покрытия достигает 450 °С, в то время как для образца с покрытием на основе алюмооксидной керамики, толщина которого 200 мкм, температура не превышает и 250 °С. Температура для образца с покрытием на основе циркониевой керамики так же лежит в районе 230 °С, однако стоит заметить, что толщина покрытия в этом случае порядка 50 мкм. Такая разница в температурах образцов с покрытиями на основе различных керамик обусловлена, тем, что теплопроводность диоксида циркония очень низкая (2,9 Вт/м·К), в отличие от оксида алюминия (30 Вт/м·К) [4]. Также полученное покрытие на основе циркониевой керамики обладает тетрагональной фазой. Выяснено, что покрытие претерпевает трансформацию из моноклинной в тетрагональную структуру, начиная с температуры 1170 °С, сопровождающуюся изменениями объема, которые могут привести к отколу керамики [5]. Такие изменения могут быть исключены добавками оксида иттрия, который снижают температуру превращения до комнатной температуры и стабилизируют тетрагональную фазу.

Работа поддержана Российским научным фондом, грант № 21-79-10035, <https://rscf.ru/project/21-79-10035/>

Список публикаций:

- [1] G. Kostyuk and V. V. Frolov (eds.), *Steam and Gas Turbines [in Russian]*, Énergoatomizdat, Moscow (1985).
[2] On the effect of ceramic target composition on coatings deposited by electron-beam evaporation at forevacuum pressure / Y. G. Yushkov, E. M. Oks, A. V. Tyunkov [et al.] // . – 2020. – Vol. 46, No. 17. – P. 27641-27646. – DOI 10.1016/j.ceramint.2020.07.259.
[3] Different stages of electron-beam evaporation of ceramic target in medium vacuum / Y. G. Yushkov, D. B. Zolotukhin, E. M. Oks, A. V. Tyunkov // . – 2020. – Vol. 127, No. 11. – P. 113303. – DOI 10.1063/1.5142420.
[4] Electron-beam deposition of heat-conducting ceramic coatings in the forevacuum pressure range / Y. G. Yushkov, E. M. Oks, A. V. Tyunkov [et al.] // *Ceramics International*. – 2020. – Vol. 46, No. 13. – P. 21190-21195. – DOI 10.1016/j.ceramint.2020.05.197.
[5] J. H. Wood and E. H. Goldman, "Protective coatings," in: *Superalloys. II. Heat Resistant Materials for Aerospace and Industrial Equipment [Russian translation]*, Metallurgiya, Moscow (1995), Vol. 2, pp. 88-116.

Синтез диэлектрических покрытий на основе циркониевой керамики с помощью форвакуумного плазменного источника электронов

Андронов Артем Андреевич

Тюньков Андрей Владимирович

Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники

Юшков Юрий Георгиевич, д.т.н.

artem.andronov.98@bk.ru

Керамические покрытия используются в различных областях применения благодаря улучшению механических и физических свойств материалов и производимых узлов. Изготовление покрытий часто включает в себя различные процессы, такие как физическое осаждение из паровой фазы (PVD), химическое осаждение из паровой фазы (CVD), золь-гель осаждение или лазерные процессы. Эти процессы приводят к получению покрытий с требуемыми механическими и физическими свойствами. Основными недостатками этих процессов являются низкая скорость нанесения и высокая стоимость процесса [1]. Альтернативным способом нанесения керамических покрытий является метод электронно-лучевого испарения керамики с использованием форвакуумного плазменного источника электронов. Формирование электронного пучка форвакуумным плазменным источником при давлениях 5–20 Па обеспечивает образование в области транспортировки пучка плотной плазмы концентрацией 10^{10} – 10^{11} см⁻³. Ионы, генерируемые при прохождении электронного пучка в пространстве дрейфа вакуумной камеры, создают условия для компенсации отрицательного заряда изолированной мишени и открывают возможность непосредственной электронно-лучевой обработки непроводящих диэлектриков без создания специальных условий для нейтрализации заряда ее поверхности.

Эксперименты по электронно-лучевому нанесению керамических покрытий проводились с использованием форвакуумного плазменного источника электронов на основе разряда с полым катодом, функционирующего в непрерывном режиме (Рис. 1) [2].

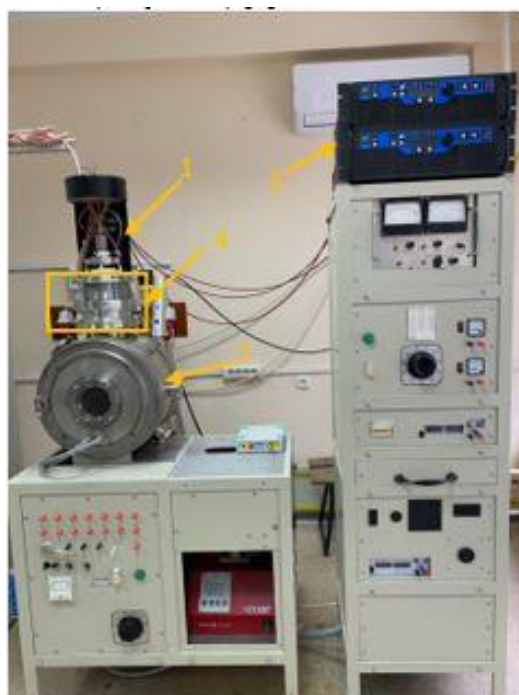


рис. 1 – фотография экспериментальной установки: 1 - источник электронов, 2 - вакуумная камера, 3 - блоки питания, 4 - система фокусировки и система отклонения пучка.

В таблице 1 показаны основные параметры проделанных экспериментов, а также их особые условия.

Таблица 1 – Основные параметры экспериментов

Образец	Параметры пучка	Время	Особые условия
1	$I=200$ мА, $U=10$ кВ	15 минут	Нет
2	$I=200$ мА, $U=10$ кВ	15 минут	Предварительный нагрев до 700°C в течении 10 минут
3	$I=200$ мА, $U=10$ кВ	15 минут	Постоянное смещение $U=1$ кВ

В первом исследовании на образец не оказывалось дополнительных воздействий. Рабочее давление в камере составляло 5 Па. Керамическая мишень помещалась в танталовый тигель. В процессе нагревания электронным пучком мощностью в пределах 1 кВт (ток пучка до 100 мА, ускоряющее напряжение до 10 кВ) керамической мишени вблизи нее образуется плазма, содержащая наряду с ионами газовой атмосферы ионы испаряемого материала. Для испарения электронный пучок фокусировался до диаметра 4 мм на керамическую мишень. После равномерного прогрева начинался процесс испарения керамики тем же способом, но мощность электронного пучка составляла в пределах 2 кВт (ток пучка не более 200 мА, ускоряющее напряжение не более 10 кВ). Результаты растровой электронной микроскопии (РЭМ) (рисунок 2а) показывают, что покрытие имеет кристаллическую структуру. Размер граней кристаллов составляет от 0,6 до 1 мкм. Белые пятна обусловлены скоплением заряда на поверхности керамического покрытия.

Во втором исследовании образец из нержавеющей стали предварительно нагревали электронным пучком до температуры 700°C в течении 10 минут при давлении 5 Па. Видно, что покрытие имеет достаточно однородную поверхность без существенных дефектов, их отсутствие связано с высокой миграционной способностью адсорбционных атомов, при значительных температурах подложки (рисунок 2б).

Условия следующего эксперимента отличались тем, что на подложку подавался постоянный потенциал с величиной $U=1$ кВ с отдельного блока питания. Исследование морфологии поверхности осажденного покрытия показало, что поверхность представляет собой структуру из зерен размерами от 0,6 до 1,2 микрон (рисунок 2в).

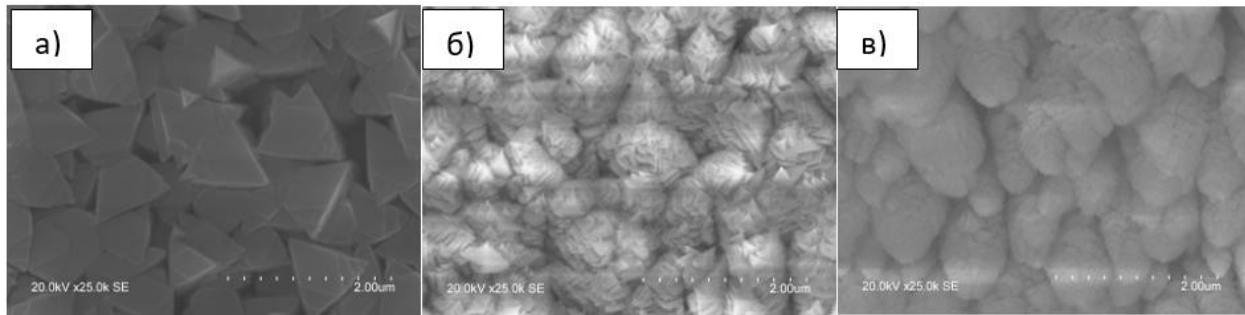


рис.2 – результаты растровой электронной микроскопии: а) образец №1, б) образец №2, в) образец №3.

Результаты проведенных исследований показали возможность нанесения покрытий из циркониевой керамики форвакуумным электронным источником. Так же проанализирована морфология и состав полученных покрытий при трех разных условиях. Обнаружено, что при изменении условий меняется процентное соотношение основных элементов покрытия, а также его структура. Дальнейшие исследования будут направлены на измерение микротвердости, толщины покрытия, шероховатости.

Работа поддержана грантом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках конкурса FEWM-2021-0013.

Список публикаций:

- [1] Holger Kassner, Roberto Siegert, Dag Hathiramani, Robert Vassen & Detlev Stoeber., *Application of Suspension Plasma Spraying (SPS) for Manufacture of Ceramic Coatings*, *Journal of Thermal Spray Technology* volume 2008, № 17, pages 115–123.
 [2] Бурдовищин В.А., Окс Е.М., Скробов Е.В., Юшков Ю.Г. Модификация поверхности керамики импульсным электронным пучком, генерируемым форвакуумным плазменным источником. *Перспективные материалы*. 2011. № 6. С. 77-82.

Автоэлектронная эмиссия с шероховатой поверхностью

Горьковская Диана Андреевна

Семенюк Наталья Степановна, Козырев Андрей Владимирович

Томский государственный университет

Семенюк Наталья Степановна, к.ф.-м.н.

diana191@inbox.ru

Опыт работы с высоковольтными вакуумными приборами еще на заре разработки и создания первых электронных ламп, электронных микроскопов, ускорителей электронов позволил обнаружить интересное явление, которое получило название автоэлектронной эмиссии. Данное явление заключается в испускании электронов поверхностью тел при наличии у границы тела сильного внешнего электрического поля порядка 10^5 В/см. Актуальной задачей современной электроники является создание стабильных автоэмиссионных катодов, которые способны работать продолжительное время в условиях технического вакуума.

Данная работа посвящена теоретическому исследованию автоэмиссионных свойств катодов, изготовленных из искусственных углеродных материалов. Основным свойством является то, что графит представляет собой тонкие углеродные трубочки, с которых идет эмиссия тока и такая структура характеризуется высоким коэффициентом усиления электрического поля при низких напряженностях полей. Коэффициент усиления μ меняется от точки к точке случайным образом, поэтому удобно ввести плотность распределения вероятности, которая выражает относительную вероятность, что произвольно выбранный малый элемент поверхности имеет коэффициент усиления, лежащий в пределах от $\mu + d\mu$ [1]. Нами была введена функция распределения для графитового катода, которая представляет собой нормальное распределение Гаусса (рис.1): $f(\mu) \propto \exp(-(\mu - \mu_1)^2 / \beta^2)$, где μ_1 - максимум плотности распределения и β - дисперсия или ширина распределения. Следующим шагом было исследовано влияние данной функции распределения на плотность автоэмиссионного тока. Подобный метод расчета автоэмиссионного тока был реализован в работе [2]. По полученным результатам были построены зависимости плотности автоэмиссионного тока (j) от напряженности электрического поля (E), при варьировании параметров функции распределения (рис.2). Результаты расчетов были сопоставлены с эмиссионными характеристиками графитового катода, полученными в эксперименте [3].

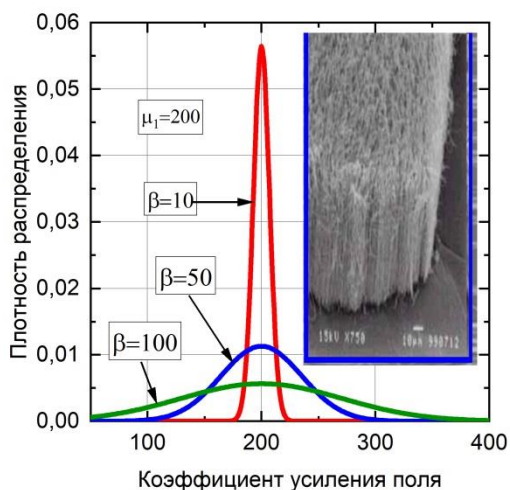


рис.1. Плотность распределения для графитового катода

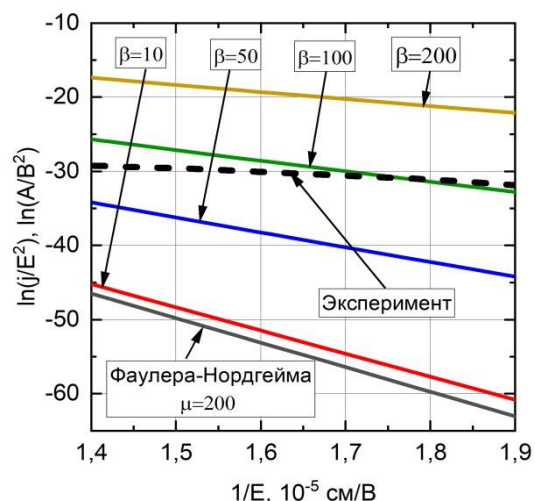


рис.2. Вольт-амперная характеристика в координатах Фавулера-Нордгейма

Предложенный подход позволяет учитывать неоднородную структуру катодной поверхности и достоверно описывать процесс автоэлектронной эмиссии. Графически было представлено, что данный подход согласуется с экспериментальными данными при следующих параметрах распределения: $\mu_1=200$, $\beta=100$.

Список публикаций:

- [1] Козырев А.В., Королев Ю.Д., Месяц Г.А. Автоэмиссионные процессы и переход от тлеющего разряда к дуговому // Журн. тех. физ. – 1987. – Т.57, В.1. – С.58-64.
 [2] N. M. Zubarev et al., "Mechanism and dynamics of picosecond radial breakdown of a gas-filled coaxial line," *Plasma Sources Science and Technology*, vol. 29, no. 12, p. 125008, Dec. 2020, doi: 10.1088/1361-6595/abc414.
 [3] Чепусов А.С. Свойства автоэмиссионных катодов из углеродных материалов в условиях технического вакуума: дис. ...канд. тех. наук: 01.04.13: утв. 13.06.18 / Чепусов Александр Сергеевич – Екатеринбург, 2018. -133 с.

О механизмах перераспределения титана в объеме $ZrO_2 - Ti$ композита при электронно-лучевом спекании

Долгова Анна Викторовна

Зенин Алексей Александрович

Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники

Климов Александр Сергеевич, д.т.н.

annedolgorova@yandex.ru

Одним из развивающихся методов получения композитной керамики является электронно-лучевое спекание в форвакуумной области давлений [1]. Узкофокусированный электронный пучок с энергией электронов 10-20 кэВ позволяет прогревать поверхность керамики до температур спекания за короткое время – не более 30 минут.

В работе [2] было выявлено, что при электронно-лучевом спекании керамических порошков с металлическими включениями распределение металлического компонента в объеме спекаемого композита изменяется в процессе спекания. Так при облучении алюмооксидной керамики с содержанием 20% (масс.) титана на поверхности спеченного образца формируется тонкий слой титана. Цель настоящего исследования – обзор механизмов, влияющих на распределение содержания титана в объеме спекаемого композита из $ZrO_2 - Ti$.

На основе анализа литературных данных были предложены два механизма уменьшения содержания металла в приповерхностном слое с облучаемой стороны композита: полевая миграция и капиллярные эффекты. При облучении пучком электронов с энергией E_0 в диэлектрике образуется объемный отрицательный заряд вблизи поверхности. Эта область распространяется на глубину пробега электронов. Возникающее электрическое поле вызывает полевую миграцию ионов титана Ti^{+} в область объемного отрицательного заряда. Мигрировавшие ионы выходят на поверхность и восстанавливаются электронами пучка с тепловыми энергиями с образованием поверхностной пленки Ti (рис. 1а). Образованная пленка испаряется с поверхности композита в

процессе электронно-лучевого облучения. Таким образом, в готовой структуре наблюдается уменьшение содержания титана в приповерхностном слое с облучаемой стороны.

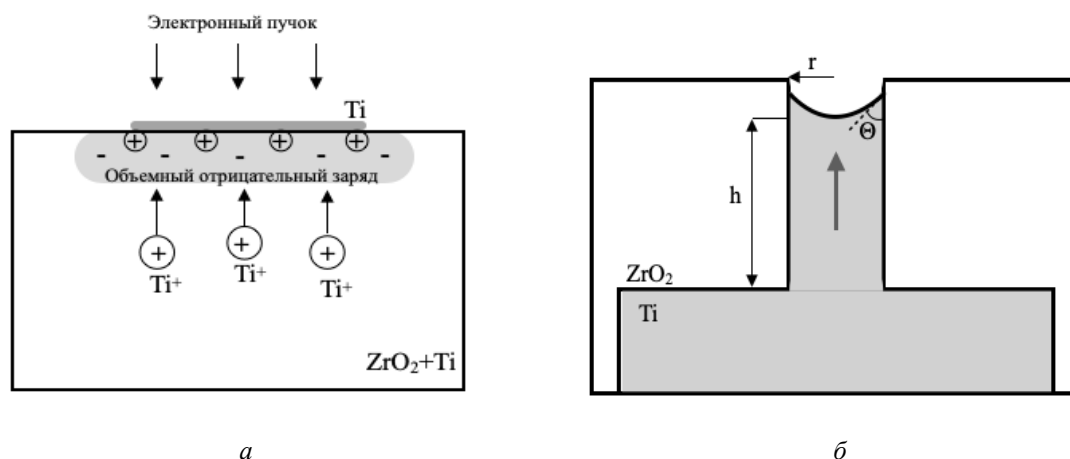


рис.1. Полевой (а) и капиллярный (б) механизмы перераспределения титана в объеме композита

Керамический образец содержит большое количество пор и при спекании образуется капиллярная структура, заполненная расплавленным титаном. Расплав смачивает стенки капилляра, образуется вогнутый мениск (рис. 1б). Под вогнутым мениском давление меньше, чем под плоской поверхностью. Поэтому расплав в капилляре поднимается до тех пор, пока гидростатическое давление поднятого в капилляре расплава на уровне плоской поверхности не скомпенсирует разность давлений. Уровень поднятия расплава можно определить по формуле Жюрене:

$$h = \frac{2\sigma \cos\theta}{\rho_{Ti}gr}, \quad (1)$$

где σ – поверхностное натяжение титана; $\cos\theta$ – смачиваемость; ρ_{Ti} – плотность титана; g – ускорение свободного падения; r – радиус капилляра.

В момент расплавления титана, при температуре 1941 К, поверхностное натяжение имеет максимальное значение. При условии полного смачивания расплав поднимается на всю толщину образца (рассчитанные значения h при температуре 1994 К ($\sigma = 1330$ мДж/м²) превышают 1 см для различных значений радиуса капилляра) и на поверхности титан испаряется. С ростом температуры почти линейно уменьшается поверхностное натяжение и уменьшается плотность титана. Таким образом, по мере нагрева образца уровень поднятия жидкости уменьшается и титан остается в нижней (необлучаемой) части образца. Кроме того, в процессе спекания происходит уменьшение пористости и капилляры зарастают, что делает невозможным выход титана из образца.

В результате проведенного исследования выявлены две возможные причины уменьшения содержания титана в приповерхностном слое керамики в процессе спекания электронным лучом: полевая миграция и капиллярные эффекты. Для определения вклада этих явлений необходимы дальнейшие исследования.

Работа выполнена при поддержке Министерства высшего образования и науки, FEWM-2021-0013

Список публикаций:

- [1] Burdovitsin V.A, Klimov A.S, Oks E.M. // *Technical Physics Letters*. 2009. V. 35. I. 6. pp. 511–513.
 [2] Климов А.С., Зенин А.А., Бакеев И.Ю., Окс Е.М. // *Известия вузов. Физика*. 2019. Т. 62. № 7(739). С.25-30

Плазмохимический синтез оксидных композиций для уран ториевого толерантного ядерного топлива для высокотемпературных газоохлаждаемых реакторов

Кузнецова Анастасия Андреевна

Национальный исследовательский Томский политехнический университет

Каренгин Александр Григорьевич, к.ф.-м.н.

aak264@tpu.ru

«Толерантное» топливо – ядерное топливо устойчивое к аварийным ситуациям на атомных электростанциях, способное сохранять целостность даже при потере теплоносителя. Такое топливо, обладает повышенной теплопроводностью, более низкой теплоемкостью, высокой жаростойкостью и ураноемкостью.

Такие свойства достигаются за счет модификации оболочки твэлов или матрицы дисперсионного ядерного топлива (ДЯТ).

Плазмохимический метод получения высокодисперсных порошков оксидных композиций может составить серьезную конкуренцию существующим методам, так как имеет ряд преимуществ, таких как: одностадийность, однородное распределение фаз, возможность влиять на морфологию частиц, компактность технологического оборудования и низкие энергозатраты.

Исследование процесса плазмохимического синтеза оксидных композиций проводилось с использованием лицензионной программы «ТЕРРА» для определения оптимального состава растворов водно-органических нитратных растворов (ВОНР), обеспечивающего их энергоэффективную плазменную обработку. В данной работе представлены результаты теоретических исследований процесса плазмохимического синтеза оксидных композиций из растворов ВОНР, включающих органический компонент (ацетон), водные растворы нитратов делящихся (уран, торий) и матричных металлов (магний, алюминий). Матричные материалы выбраны с учетом удовлетворения критериям: высокой теплопроводности, низкого сечения захвата тепловых нейтронов, отсутствия взаимодействия с ураном, относительной простоты производства и прочности сплавов, более подробно [1].

Для обеспечения энергоэффективной плазменной переработки в воздушно-плазменном потоке используются растворы, имеющие адиабатическую температуру горения $T_{ад} = 1500-1600$ К, подробнее [2]. Одним из не менее важных параметров в процессе плазменной переработки является массовая доля воздуха, активно влияющая на состав получаемой топливной композиции при коэффициенте отношении делящегося компонента к неделящемуся $\alpha=0.5$ (рис.1).

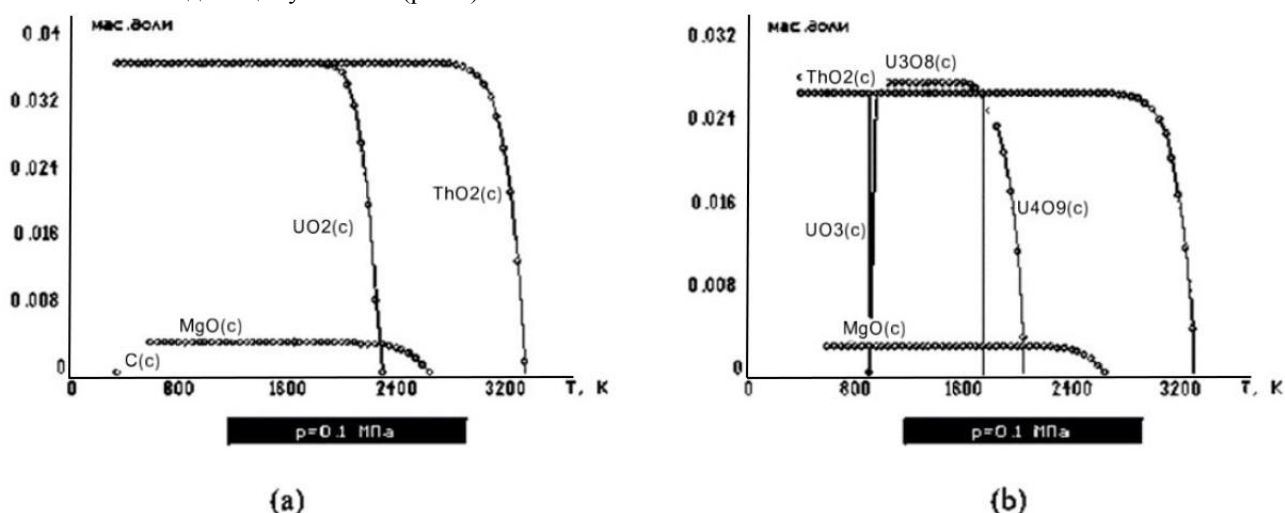


рис.1. Зависимость состава основных продуктов от температуры после плазменной обработки, при параметрах $\alpha=0.5$, массовой доле воздуха 57 % (а) и 59 % (б) и MgO 5 %

В ходе исследования получены 8 составов ВОНР при $\alpha = 0.5 - 0.8$, содержании оксидной матрицы MgO и Al_2O_3 (5%) и содержании воздуха (55 и 57%), обеспечивающих наиболее энергоэффективную подработку.

Полученные результаты могут быть использованы при создании технологии плазмохимического синтеза топливных оксидных композиций ДЯТ для высокотемпературных газоохлаждаемых реакторов.

Список публикаций:

[1] Kleykamp H. // *J. Nucl. Mater.* 1999. V. 275. No 1–2. P. 1.

[2] Karengin, A. A. Karengin, I. Yu. Novoselov. e.a. // *Journal of Physics: Conference Series.* 2021. Vol. 1989. P. 1–5.

Изготовление трансформатора Тесла на основе фундаментальных физических законов и уравнений Кирхгофа

Параскун Александр Григорьевич

Новосибирский государственный университет

Пальчиков Евгений Иванович, д.т.н.

a.paraskun@ngsu.ru

Для решения научных и технических задач, бывает необходимо иметь импульсные источники напряжений порядка мегавольта. Во многих случаях, в качестве таких источников используются трансформаторы Тесла. Например, трансформатор Тесла лежит в основе импульсных рентгеновских аппаратов, разрабатываемых в ИГиЛ СО РАН [1] для исследования взрывных и быстротекущих процессов и промышленных ускорителей ИЯФ СО РАН [2] для обработки материалов. Как правило, любители при создании трансформаторов Тесла используют эмпирические формулы и калькуляторы, распространенные в интернете. Однако давно существуют работы, в которых приводятся подробные теоретические модели трансформатора Тесла [2, 3]. С другой стороны, трансформатором Тесла многие называют одиночный колебательный контур, возбуждаемый электронной схемой в резонанс с положительной обратной связью. Хотя это устройство некоторые называют «качером Бровина», Тесла запатентовал такое устройство сто с лишним лет назад [4].

Целью данной работы являлось проектирование и изготовление большого классического трансформатора Тесла с выходным напряжением 10^6 В, состоящего из двух связанных настроенных в резонанс контуров с ударным возбуждением на основе фундаментальных теоретических моделей и экспериментальных измерений, полученных в процессе изготовления. Достижение оптимальных параметров по передаче энергии между контурами, доработка конфигурации электрических и магнитных полей устройства для увеличения КПД устройства. Трансформатор необходим для проведения физических опытов в лаборатории демонстраций и компьютерного сопровождении (ЛДКС) физического факультета НГУ.

Принципиальная схема разработанного устройства приведена на рис. 1. Наиболее сложным этапом создания трансформатора Тесла является вторичный контур, который в нашем случае состоит из 784 метров медного провода с диаметром 0,75 мм, намотанного на пластиковую трубу диаметром 200 мм, высотой 1 метр и покрытого слоем эпоксидной смолы. Таким образом, первым этапом создания трансформатора было изготовление вторичного контура. Далее, для расчета параметров всего трансформатора, были использованы фундаментальные физические законы, в частности – уравнения Кирхгофа для связанных контуров с начальными и граничными условиями и модели, предложенные в работах [2, 3].

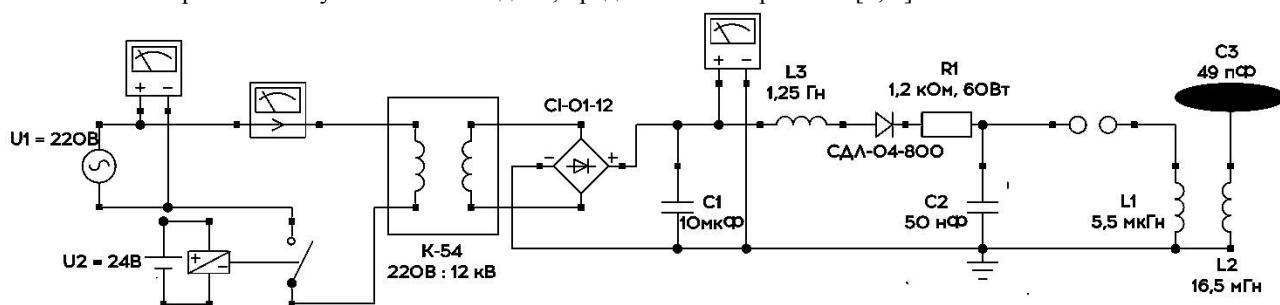


рис. 3 Принципиальная схема трансформатора Тесла

Измеренная резонансная частота вторичного контура в случае четвертьволнового резонанса с проводящей полуплоскостью и замкнутым тороидом составила 221 кГц, с добротностью 64,8. Емкость вторичного контура C_3 сосредоточена в межвитковой емкости катушки, которая равняется 16,8 пФ, при индуктивности 16,5 мГн, а также в емкости замкнутого тороида, равной 32 пФ.

Емкость первичного контура равняется $C_2 = 0,05$ мкФ. Рабочее напряжение конденсаторов – 25 кВ. В результате вычислений расчетная максимальная индуктивность первичного контура составила $L_1 = 5,5$ мкГн, подобранная таким образом, чтобы оба контура работали в резонанс. Изготовленная индуктивность первичного контура состоит из 9 витков медной трубы диаметром от 290 до 600 мм с возможностью подсоединения гибкого отвода в любом месте. С тороидом резонанс наблюдается на 5 витках. Для согласования с сетью 220В, устранения пульсаций 50 Гц, передача энергии происходит через большую буферную емкость $C_1 = 10$ мкФ. Процесс передачи энергии из буферной ёмкости в первичную ёмкость C_2 производится практически без потерь – через индуктивный буферный дроссель L_3 (индуктивностью 1,25 Гн) с диодным удвоением напряжения с 12 кВ до 24 кВ. В момент разрядки C_2 сопротивление R_1 разделяет первичный контур и схему зарядки, и гасит искру в разряднике. Частота пробоя разрядника управляется с помощью механической системы.

Электрическая прочность по скользящему поверхностному разряду на границе раздела диэлектрик – воздух составляет около 1 кВ/мм. Так как длина вторичной катушки равняется 1 метру, то при напряжении, превосходящем значение 1 МВ, могут наблюдаться скользящие разряды вдоль колонны, что устанавливает верхнюю границу на выходное напряжение трансформатора, и определяет напряжение зарядки первичного контура – 18 кВ.

В связанных колебательных контурах, колебания происходят с частотой $\omega_{св.}$, при этом их амплитуда меняется по гармоническому закону с частотой $\omega_{б.}$, с образованием биений. Один цикл таких колебаний составляет половину периода огибающей. В [2] приводится отношение, связывающее коэффициент связи k , а также отношение $\omega_{св.}/\omega_{б.}$ и количества полуволн колебаний n в течение одного периода биений.

А именно, существуют оптимальные коэффициенты связи $k = 2n/(n^2+1) = 0,6; 0,385; 0,28; 0,22, \dots$ при которых число полуволн в цикле нечетное, а в середине цикла биений максимум огибающей совпадает с максимумом полуволны. При этих условиях наблюдается максимально возможный КПД передачи энергии из первичного колебательного контура во вторичный.

Экспериментально измеренные осциллограммы биений в контурах показывают, что максимальная передача энергии с КПД не хуже 80% в нашем случае наблюдается на 7 полуволне колебаний при $k = 0,153$. При достижении напряжения 10^6 В и блоке питания мощностью 1 кВт максимальная частота импульсов составляет 50 Гц. Энергия искры 16 Дж. Мощность циркулирующей в аппарате энергии порядка 10 МВт, при разряде искрой на нагрузку ее значение составляет 100 – 1000 МВт.

Автор выражает благодарность Пальчикову Е.И. и Захарову С.А. за руководство и помощь в изготовлении устройства.

Список публикаций:

- [1] Пальчиков Е.И., Биченков Е.И. Приборы и некоторые методы импульсной рентгенографии быстропротекающих процессов. // Физика горения и взрыва. - 1997.- т.33, №3.- стр. 159-167.
- [2] Вассерман С.Б. Трансформатор Тесла в высоковольтных ускорителях заряженных частиц: Новосибирск. 1979 (Препр. / ИЯФ СО АН СССР № 77 - 110. 42 с.) http://irbiscorp.spsl.nsc.ru/fulltext/prepr/1977/p1977_110.pdf
- [3] Oberbeck A. Ueber den Verlauf der electrischen Schwingungen bei den Tesla'schen Versuchen. // Annalen der Physik und Chemie. 1895. V. 55.
- [4] Nikola Tesla. US Patent 645576 Nikola Tesla 1897 System of transmission of electrical energy

Магнетрон с нагреваемой в разряде мишенью для формирования многокомпонентных покрытий на основе бора

Фролова Валерия Петровна

Юшков Георгий Юрьевич

Институт сильноточной электроники СО РАН

Frolova Valeria 90@mail.ru

Магнетронное распыление [1] относится к плазменным методам формирования покрытий на поверхности. Покрытия из соединений бора, благодаря своим высоким функциональным свойствам, представляют интерес для ряда применений [2]. Однако, при нормальных условиях чистый (99,9 ат. %) бор обладает высоким удельным сопротивлением около 10 МОм×см [3]. Это не позволяет обеспечить устойчивое зажигание магнетронного разряда с катодом (распыляемой мишенью) из бора. Для решения проблемы формирования покрытий из бора был развит следующий подход. В магнетронном планарном распылителе термоизолированная мишень из бора предварительно нагревалась слаботочным высоковольтным разрядом [4]. Так как бор имеет отрицательный температурный коэффициент электрического сопротивления, то уже при нагреве мишени до 450 °С оно снижается до уровня 10 Ом×см и обеспечивается стабильное зажигание магнетронного разряда.

Конструкция планарного магнетрона с термоизолированной нагреваемой мишенью из кристаллического бора, используемого в экспериментах, представлена на рис. 1.

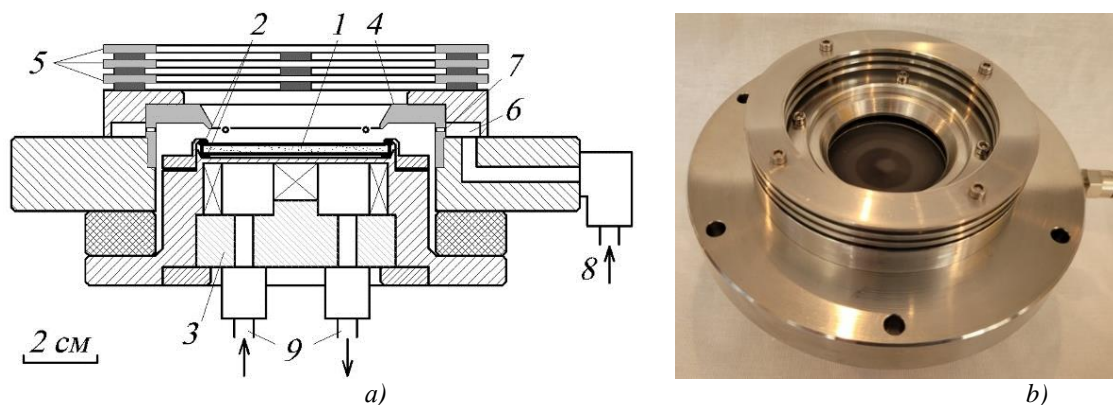


рис. 1. Принципиальная конструкция магнетрона с термоизолированной нагреваемой мишенью из бора (а) и его фотография (b): 1 мишень из бора; 2 термоизолирующие прокладки из графита; 3 магнитная система на постоянных магнитах; 4 анод; 5 анодные кольца; 6 газовая полость; 7 отверстия для перераспределения газа; 8 подача рабочего газа; 9 водяное охлаждение.

Термическая изоляция мишени диаметром 51 мм, толщиной 4 мм от охлаждаемой водой магнитной системы осуществлялась кольцевыми прокладками толщиной 1 мм из электропроводящей графитовой фольги [5]. Прокладки сохраняли эластичность при повышенной температуре, что позволило обеспечить надежную работу магнетрона в многократных циклах нагрева и охлаждения мишени. Образование покрытия из бора на аноде магнетрона при распылении мишени могло приводить к электрической изоляции его поверхности и погасанию разряда. Поэтому стандартный анод магнетрона был дополнен системой из плоских колец, разделенных щелями шириной 2 мм. На поверхности колец в щелях формирование покрытия бора происходило с меньшей интенсивностью и это позволило обеспечить стабильное функционирование разряда в течение десятков часов. Другой конструктивной особенностью анода магнетрона было наличие анодной полости с равномерно расположенными по её внутреннему диаметру отверстиями, обеспечивающими равномерное распределение потока рабочего газа (аргона) в область мишени. Это позволяло снизить предельное рабочее давления разряда на 30% и напряжение его горения на величину до 50 В.

Для электрического питания магнетронного разряда использовался стабилизированный источник Spellman SL6PN300 с регулируемым постоянным током до 50 мА и напряжением до 6 кВ. При нагреве мишени из бора возможно ее растрескивание из-за возникающих механических напряжений. Поэтому была экспериментально определена следующая процедура нагрева мишени. Сначала зажигался слаботочный разряд с токами уровня 1 мА и напряжением горения (4 - 5) кВ. Далее ток разряда увеличивался со скоростью ≤ 15 мА/мин. Приблизительно через (3,5 - 5) мин ток достигал рабочего значения 50 мА, при котором проводилось нанесение покрытия бора на подложку. Давление аргона в камере при этом поддерживалось регулятором расхода газа РРГ-10 на уровне 2 мТорр. Температура электронов плазмы T_e , измеренная одиночным лэнгмюровским зондом для случая магнетронного разряда, составляла величину уровня $T_e \approx 4$ эВ. Скорости нанесения покрытий бора в случае использования аргона в качестве рабочего газа при мощности разряда уровня 200 Вт составляют около 7 нм/мин. Магнетрон планируется использовать для нанесения покрытий на основе соединения бора с газами: типа оксидов, нитридов или карбидов бора.

Работа была выполнена за счет гранта Российского Научного Фонда № 22-29-00381, <https://rscf.ru/project/22-29-00381/>.

Список публикаций:

- [1] I. Kelly P.J. and Arnell R.D. // *Vacuum*. 2000. Vol. 56. P. 159-172.
- [2] Nakamura K. // *J. Electrochem. Soc.* 1984, Vol. 131, P. 2691-2697.
- [3] Greiner E.S. and Gutowski J.A. // *J. Appl. Phys.* 1957. Vol. 28. P. 1364-1365.
- [4] Vizir A., Nikolaev A., Oks E., Savkin K., Shandrikov M., and Yushkov G. // *Rev. Sci. Instrum.* 2014. Vol. 85. P. 02C302.
- [5] Ivanov A.V., Maksimova N.V., Kamaev A.O., Malakho A.P., and Avdeev V.V. // *Mater. Lett.* 2018. Vol. 228. P. 403-406.

Исследование плазмохимического процесса синтеза топливных оксидных композиций из водно-органических нитратных растворов урана, плутония и магния

Щербина Данил Сергеевич

Томский политехнический университет

Каренгин Александр Григорьевич, к.ф.-м.н.

dss44@tpu.ru

На сегодняшний день АЭС производят значительную часть мощностей для мировой энергетики. Потенциал к развитию и расширению данной отрасли огромны в силу ее экологичности и надежности, именно поэтому рассматриваются различные способы по улучшению производительности АЭС.

Одним из способов является переход на замкнутый топливный цикл и, как следствие, создание необходимого топлива, которое бы подходило под данный процесс. Таким топливом, на сегодняшний день, является REMIX-топливо, относящееся к дисперсионному ядерному топливу (ДЯТ).

Использование REMIX-топлива приводит к экономии урана, так как потенциально имеется возможность в рециклировании плутония без его существенной деградации. Таким образом, переработка с некоторым повторным дообогащением может обеспечивать многократное возвращение топлива в реактор, что сокращает потребление урана реактором и накопление отработанного ядерного топлива. В то время как обычное топливо деградирует на столько, что становится полностью непригодным для работы.

Традиционные методы получения ДЯТ (раздельное получение и механическое смешение, «золь-гель», порошковая металлургия и др.) многостадийны, продолжительны, не обеспечивают равномерное распределение фаз, требуют большого количества химических реагентов и энергозатрат. Применение плазмохимического синтеза ДЯТ в виде топливных оксидных композиций (ТОК) из диспергированных водно-органических нитратных растворов (ВОНР) обеспечивает одностадийность, высокую скорость, равномерное распределение и требуемый состав фаз.

Плазмохимический метод получения высокодисперсных порошков оксидных композиций может составить серьезную конкуренцию существующим методам, так как имеет ряд преимуществ, таких как: одностадийность, компактность технологического оборудования, высокая скорость. Целью работы являлось моделирование и исследование процесса плазмохимического синтеза оксидных композиций с использованием лицензионной программы "ТЕРРА" и определение оптимального состава ВОНР, обеспечивающего их энергоэффективную плазменную обработку.

В данной работе представлены результаты теоретических исследований процесса плазмохимического синтеза оксидных композиций из ВОНР, включающих органический компонент (этанол, ацетон), водные растворы нитратов делящихся (уран, плутоний) и матричных (магний) металлов.

Магний был выбран из-за его низкого сечения захвата тепловых нейтронов (0,06 барн), отсутствия взаимодействия с ураном, относительной простоты производства и прочности сплавов [1].

Низшую теплотворную способность ВОНР определяли по следующему уравнению [2].

$$Q_H^p = \frac{(100-W-A)Q_H^g}{100} - \frac{2,5W}{100}, \quad (1)$$

где – низшая теплотворная способность горючего компонента, МДж/кг; W – содержание воды, A – негорючих минеральных веществ в композиции %; коэффициент 2,5 учитывает скрытую теплоту испарения воды при 0 °С, МДж/кг.

Более объективным показателем горючести ВОНР является адиабатическая температура горения, которую оценивали по данной формуле:

$$T_{ад} = \frac{(100-v_{ок})Q_H^p + v_{ок}C_{ок}t_{ок}}{100Vc}, \quad (2)$$

где $v_{ок}$ – массовая доля окислителя (воздуха), %; $C_{ок}$ – теплоемкость окислителя, кДж/(кг·К); $t_{ок}$ – температура окислителя, К; V – удельный объем продуктов плазменной переработки ВОНР, м³/кг; c – объемная равновесная теплоемкость продуктов плазменной переработки ВОНР, кДж/(м³·К).

ВОНР, имеющие $T_{ад} \approx 1500$ К и $Q_H^p \geq 8,4$ МДж/кг обеспечивают их энергоэффективную плазменную переработку в воздушно-плазменном потоке [3].

Оптимальные значения теплотворной способности и температуры при коэффициентах α (отношении делящегося компонента к неделящемуся) равному 4,4% показано на (рис. 1).

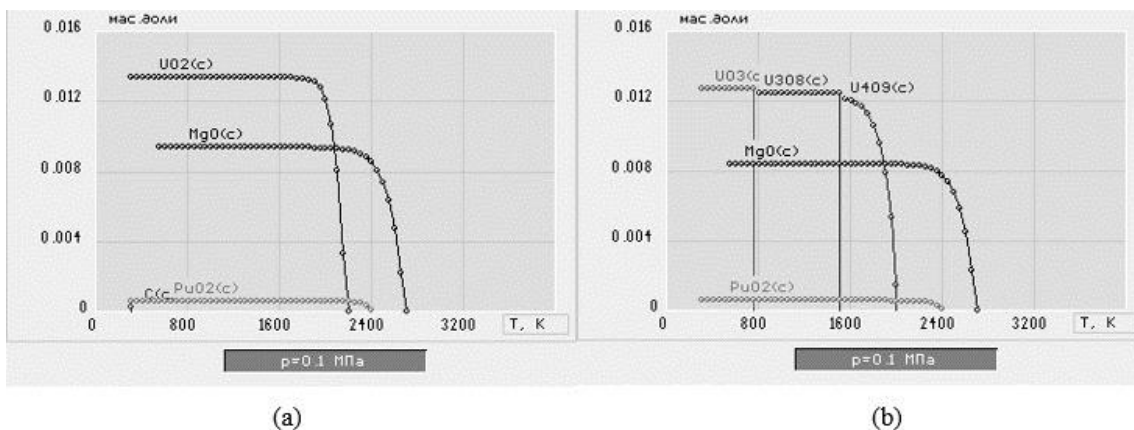


рис. 1 Зависимость состава основных продуктов на основе этанола от температуры после плазменной обработки при $\alpha=0,044$ и массовой доле воздуха 71 % (а) и 74 % (б). (MgO 40 %)

Из более чем семидесяти полученных ВОНР только 4 подошли к требованиям обеспечивающих их энергоэффективную плазменную переработку в воздушно-плазменном потоке. Все 4 ВОНР получены исключительно на этаноле при $\alpha = 0,033$ и $0,044$ при высокой массовой доле содержания MgO (40 и 50%) и высоком содержании воздуха (72 и 73%).

Результаты расчетов могут быть использованы при создании технологии и оборудования для плазмохимического синтеза оксидных композиций из ВОНР и других растворов.

Список публикаций:

- [1] Kleykamp H. // *J. Nucl. Mater.* 1999. V. 275. No 1–2. P. 1.
- [2] Novoselov I.Yu., Karegin A.G., Shamanin I.V. e.a. // *AIP Conference Proceedings.* 2018. Vol. 1938. P. 1–7.
- [3] Karegin, A. A. Karegin, I. Yu. Novoselov. e.a. // *Journal of Physics: Conference Series.* 2021. Vol. 1989. P. 1–5.

6 – Магнетизм

Богуславский Лев Георгиевич, 3 курс
Екатеринбург, Уральский федеральный университет, институт естественных наук и математики
Анализ топологической структуры плоскостной компоненты векторного поля систем магнитов
Иванов Владимир Елизарович, к.ф.-м.н.
e-mail: lev.bog12@gmail.com стр. 98

Верясова Алена Александровна, 4 курс
Екатеринбург, Уральский федеральный университет, департамент фундаментальной и прикладной физики
Синтез и магнитные свойства нанопроволок в тонкопленочном слое оксида алюминия на постоянном токе
Кулеш Никита Александрович, к.ф.-м.н.
e-mail: alenaver75@gmail.com стр. 99

Говорина Валерия Валерьевна, 4 курс
Екатеринбург, Уральский федеральный университет, департамент фундаментальной и прикладной физики
Магнитные и магнитокалорические свойства $MnAs$ в условиях гидростатического сжатия
Незнахин Дмитрий Сергеевич, к.ф.-м.н.
e-mail: valeria.govorina@urfu.me стр. 100

Голубятникова Александра Александровна, 4 курс
Екатеринбург, Уральский федеральный университет, физический
Влияние инфильтрации легкоплавких добавок на магнитные гистерезисные свойства быстрозакаленного нанокристаллического сплава на основе соединения Nd-Fe-B
Волегов Алексей Сергеевич, к.ф.-м.н.
e-mail: a.a.golubiatnikova@urfu.me стр. 101

Гриднева Гульназ Тимуровна, магистрант 2 года обучения
Уфа, Уфимский университет науки и технологий, физико-технический институт
Неоднородный магнитоэлектрический эффект в феррит-гранатовых плёнках типа (111)
Вахитов Роберт Миннисламович, д.ф.-м.н.
e-mail: gulnaz.ahmadeeva2007@yandex.ru стр. 102

Гуляев Кирилл Евгеньевич, 4 курс
Екатеринбург, Уральский федеральный университет, институт естественных наук и математики
Изучение температурной зависимости коэрцитивной силы в области температуры магнитной компенсации в пластинах ферритов-гранатов
Мехоношин Дмитрий Сергеевич
e-mail: evilcows950@mail.ru стр. 104

Зуева Екатерина Андреевна, 4 курс
Великий Новгород, Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого
Разработка системы сбора энергии на магнитоэлектрическом эффекте
Леонтьев Виктор Сергеевич
e-mail: Ekaterina.Zueva@novsu.ru стр. 105

Иванов Сергей Вадимович, 4 курс
Великий Новгород, Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого, электроники
Низкочастотная магнитоэлектрическая антенна
Бичурин Мирза Имамович, д.ф.-м.н.
e-mail: sivanovvad@mail.ru стр. 106

Ивашева Елена Евгеньевна, 3 курс
Великий Новгород, Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого, конструирование и технология электронных средств
Термомагнитная обработка аморфного сплава для магнитоэлектрических применений
Бичурин Мирза Имамович, д.ф.-м.н.
e-mail: ellen9879@yandex.ru стр. 108

Ильясова Галия Флюсовна, аспирант
Уфа, Уфимский университет науки и технологий, физико-технический институт
Структура и свойства кт-скирмионов в ферромагнитных пленках с колумнарным дефектом
Вахитов Роберт Миннисламович, д.ф.-м.н.
e-mail: galiya.siraeva2014@yandex.ru стр. 109

Кафаров Руслан Гайдарович, 3 курс
Великий Новгород, Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого, конструирование и технология электронных средств
Моделирование микрополоскового СВЧ магнитоэлектрического фазовращателя
Лобекин Вячеслав Николаевич
e-mail: evraudx14@gmail.com стр. 111

Марков Иван Юрьевич, 3 курс
Великий Новгород, Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого, конструирование и технология электронных средств
Система измерения постоянных токов на основе тороидальной магнитоэлектрической структуры
Бичурин Мирза Имамович, д.ф.-м.н.
e-mail: ivanmarckov02@mail.ru стр. 112

Низямова Алина Рамилевна, аспирант 3 года обучения
Уфа, Уфимский университет науки и технологий, физико-технический институт
Поведение 0° градусных доменных границ в магнитоодноосных пленках с флексомагнитоэлектрическим эффектом во внешнем магнитном поле
Вахитов Роберт Миннисламович, д.ф.-м.н.
e-mail: alya.nizyamova.96@mail.ru стр. 114

Орехова Светлана Михайловна, 3 курс
Ставрополь, Северо-Кавказский федеральный университет, физико-технический
Неустойчивость двумерной капли магнитной жидкости в магнитном поле
Закиян Артур Робертович, д.ф.-м.н.
e-mail: lanafox189@mail.ru стр. 115

Рогозникова Наталья Сергеевна, 4 курс
Екатеринбург, Уральский федеральный университет, институт естественных наук и математики
Исследование колебаний доменных границ в кристаллах ферритов-гранатов
Мехоношин Дмитрий Сергеевич
e-mail: nataschaniga@mail.ru стр. 116

Ромашко Полина Евгеньевна, 1 курс
Екатеринбург, Уральский федеральный университет, департамент фундаментальной и прикладной физики
Магнитная структура $\text{LiNi}_{0.1}\text{Co}_{0.9}\text{PO}_4$
Сёмкин Михаил Александрович, к.ф.-м.н.
e-mail: romashko.polina.2014@mail.ru стр. 117

Северова Светлана Владимировна, 4 курс
Екатеринбург, Уральский федеральный университет, департамент фундаментальной и прикладной физики
Особенности эффекта обменного смещения в пленках типа CrMn/FeNi
Васьковский Владимир Олегович, д.ф.-м.н.
e-mail: severova.sveta.severova@yandex.ru стр. 118

Тимофеева Анастасия Владимировна, м.н.с.
Екатеринбург, Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, отдел магнитных материалов
Влияние термомагнитной обработки на свойства магнитомягких сплавов Fe-Ge
e-mail: timofoeva_av@imp.uran.ru стр. 120

Филиппова Виктория Владимировна, магистрант 2 года обучения
Уфа, Уфимский университет науки и технологий, физико-технический институт
Влияние размеров слоев на связанную динамику магнитных вихрей в мультислойных проводящих наноцилиндрах
Екомасов Евгений Григорьевич, д.ф.-м.н.
e-mail: mukhamadeeva.vika@mail.ru стр. 121

Шалагинов Аркадий Николаевич, 4 курс
Екатеринбург, Уральский федеральный университет, институт естественных наук и математики
Исследование магнитных свойств сплавов системы Sm-Fe-V, полученных с использованием метода быстрой закалки
Волегов Алексей Сергеевич, к.ф.-м.н.
e-mail: arkady.shalaginov@urfu.me стр. 122

Анализ топологической структуры плоскостной компоненты векторного поля систем магнитов

Богуславский Лев Георгиевич

Иванов Владимир Елизарович, Фещенко Анастасия Александровна, Андреев Сергей Витальевич,
Лепаловский Владимир Николаевич

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина
Институт естественных наук и математики

Иванов Владимир Елизарович, к.ф.-м.н.
lev.bog12@gmail.com

Миниатюризация магнитных систем – насущная проблема современных технологий [1], которая предполагает знание детальной конфигурации неоднородного магнитного поля. В настоящее время существует множество методов визуализации неоднородных магнитных полей. Один из них основан на использовании продольного и поперечного эффектов Керра с последующей векторизацией полученных магнитооптических изображений (рис.1). Таким образом, можно получить распределение поля в плоскости наблюдения в виде векторных графиков. Последние исследования показали перспективность этого метода [2].

Целью нашей работы была визуализация неоднородных полей, построения векторных графиков направлений плоскостной компоненты поля и анализ изменения топологической структуры поля при действии однородного поля смещения.

В качестве индикаторной пленки использовалась аморфная пленка с составом $\text{Fe}_{73.5}\text{Cu}_1\text{Nb}_3\text{Si}_{13.5}\text{B}_9$.

Векторные графики на рис.1.(д) и (е) построены с использованием магнитооптических изображений в поперечной (рис.1.(а) и (б)) и продольной (рис.1.(в) и (г)) чувствительностях, по методике, подробно описанной в [2]. Они отображают изменение топологической структуры неоднородного поля двух магнитов в плоскости индикаторной пленки с увеличением напряженности внешнего однородного магнитного поля. Изменение топологии векторного поля происходит движением особых точек в плоскости наблюдения, которые на рисунке обозначены следующим образом: истоки – “So”, стоки – “Si”, седлообразные – “Sa”.

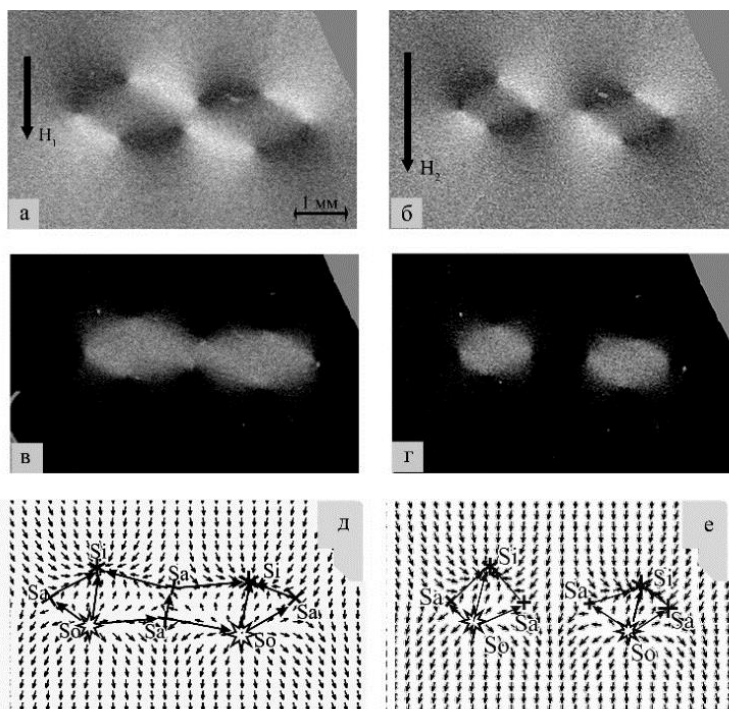


рис.1 Магнитооптические изображения неоднородного поля, создаваемого двумя магнитами в продольной (а, б) и поперечной (в, г) чувствительностях и соответствующие им векторизации, полученные путем компьютерной обработки (д, е). Крупными стрелками обозначен скелет векторного поля. H_1, H_2 – напряженности внешнего однородного магнитного поля для всех изображений в левом и правом столбцах соответственно, при том $H_1 < H_2$.

Для лучшего понимания изменения топологии на рисунок был нанесен скелет магнитного поля [3]: крупными стрелками соединены особые точки, имеющие общие силовые линии. Качественная перестройка скелета демонстрирует переход от одной структуры к другой топологически не эквивалентной ей.

Скелет плоскостного векторного поля является сечением пространственного скелета, построение которого в дальнейших исследованиях может дать представление о глобальной структуре поля.

Список публикаций:

[1] L.F. Zanini, O. Osman, M. Frenea-Robin, N. Haddour, N.M. Dempsey, et al. // *Micromagnet structures for magnetic positioning and alignment*, *J. Appl. Phys.* 111, (2012) 07B312.

[2] Ivanov V.E., Gorkovenko A.N., Lepalovskij V.N. // *Journ. Magn. Magn. Mat.* 570 (2023) 170493

[3] Dana W. Longcope // *Living Rev. Solar Phys.*, 2, (2005), 7

Синтез и магнитные свойства нанопроволок в тонкопленочном слое оксида алюминия с подслоем титана полученных в режиме постоянного тока

Верясова Алена Александровна

Дрягина Анастасия Евгеньевна, Горьковенко Александр Николаевич, Кулеш Никита Александрович, Васьковский Владимир Олегович

Уральский федеральный университет

Кулеш Никита Александрович

Alenaver75@gmail.com

Магнитные нанопроволоки обладают уникальным набором свойств, обусловленных особенностями морфологии, и относятся к перспективному классу магнитных наноматериалов, представляющих интерес для различных областей науки и техники, такие как: среды для записи информации, сенсоры, устройства спинтроники, биомедицина и т.д. [1]. Однако, основной трудностью является разработка универсальных методов изготовления и синтеза магнитных нанопроволок, и в частности, интерес представляет получение магнитных нанопроволок с использованием электроосаждения в режиме постоянного тока, что обеспечивает лучший контроль их состава и дает возможность подведения электрических контактов с обеих торцевых сторон.

В настоящей работе нами рассмотрены альтернативные пути создания массивов нанопроволок в тонкопленочном слое оксида алюминия. А также были исследована морфология и измерены магнитные свойства нанопроволок, синтезированных в режиме постоянного тока в тонких пленках алюминия (Al) и пленках алюминия с подслоем титана (Al/Ti).

Для синтеза нанопроволок использовался метод электролитического осаждения в пористые матрицы оксида алюминия в режиме постоянного тока. В качестве основы для получения матриц использовались тонкие пленки Al, либо Al/Ti, полученные методом ионного распыления, толщиной 2 мкм. Пористые матрицы были получены методом анодирования в водном растворе щавелевой кислоты при напряжении 40 В, при комнатной температуре [2]. Длина полученных нанопроволок составила в среднем – 1,6 мкм, диаметр – 60 нм.

Для аттестации магнитных свойств были проведены измерения на вибрационном магнитометре Lake Shore. Измерение проводилось в двух направлениях: параллельно и перпендикулярно оси массива нанопроволок. Структурные свойства образцов исследовались на электронном микроскопе Tescan Mira3 LMU.

В качестве примера на рисунке продемонстрированы петли гистерезиса для образцов, полученных в пленках Al (рис.1, а) и Al/Ti (рис. 1, б). Полученные нанопроволоки обладают выраженной одноосной магнитной анизотропией в направлении, параллельном оси массива нанопроволок. Нанопроволоки, полученные в пленках Al/Ti имеют более высокую коэрцитивную силу. Добавление подслоя Ti улучшило адгезию полученных пленок и предотвратило отслаивания шаблона.

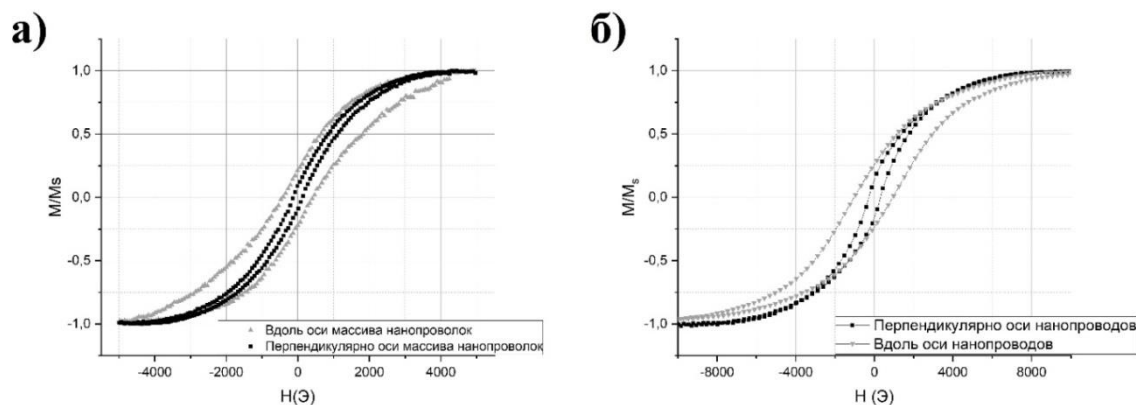


рис.1. Петли гистерезиса, измеренных в направлении вдоль или перпендикулярно оси нанопроволок Co, полученных с использованием электроосаждения DC-режиме в тонкой пленке Al(a) и Al/Ti (б).

Список публикаций:

- [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.

Магнитные и магнитокалорические свойства MnAs в условиях гидростатического сжатия

Говорина Валерия Валерьевна

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина

Незнахин Дмитрий Сергеевич, к.ф.-м.н.

valeria.govorina@urfu.me

Для соединения MnAs при атмосферном давлении характерен магнитоструктурный фазовый переход 1 рода в области комнатных температур. При повышении гидростатического давления температура перехода снижается [1]; помимо этого, наблюдаются нелинейное поведение изотермического изменения магнитной энтропии – количественной характеристики магнитокалорического эффекта (МКЭ) [2]. Результаты в работе [2] приведены для поликристаллического образца MnAs. Однако в силу наличия магнитокристаллической анизотропии МКЭ может вести себя по-разному при измерении вдоль различных кристаллографических направлений. Поэтому интерес представляет поведение монокристаллических образцов под давлением, а именно их кривые намагничивания вдоль разных кристаллографических осей, температуры фазового перехода 1 рода как при нагревании, так и при охлаждении, количественные характеристики МКЭ.

Для создания давления использовалась ячейка давления Easy Lab 10, которая способна создавать гидростатическое давление до 10 кбар. Магнитные свойства образца, находящегося в ячейке, измерялись на установке MPMS-XL в полях с напряженностью до 70 кЭ. Давление внутри ячейки определено с использованием оловянного манометра. В магнитных измерениях учтены магнитная предыстория образца, наличие замороженного магнитного поля в сверхпроводящем соленоиде, размагничивающий фактор образца. 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.

В настоящей работе измерены кривые намагничивания монокристалла MnAs как при атмосферном давлении, так и в условии гидростатического сжатия. Также измерены температурные зависимости намагниченности монокристалла под давлением с целью уточнения границ фазового перехода. При приложении давления наблюдается изменение намагниченности насыщения образца, меняются гистерезисные свойства, как по напряженности внешнего поля, так и по температуре. Температура магнитного фазового перехода 1 рода при увеличении давления довольно значительно смещается в область более низких температур, а гистерезис перехода увеличивается (рис.1). В работе проведено сравнение изотермического изменения магнитной энтропии, рассчитанное из измерений при разных условиях.

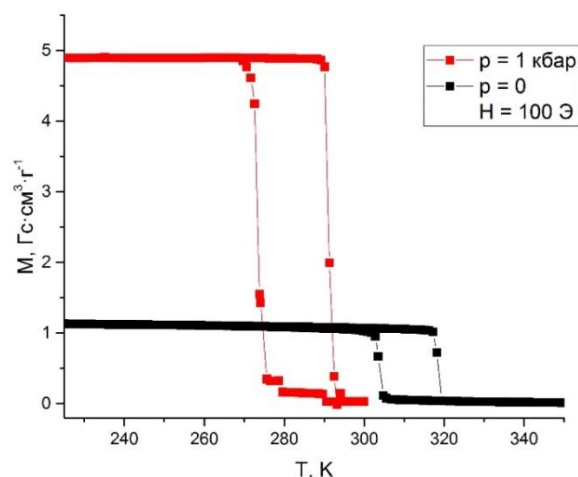


рис.1. Зависимость намагниченности монокристалла MnAs от температуры в магнитном поле $H = 100$ Э

Список публикаций:

- [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

Влияние инфильтрации легкоплавких добавок на магнитные гистерезисные свойства быстроокаленного нанокристаллического сплава на основе соединения $Nd_2Fe_{14}B$

Голубятникова Александра Александровна

Шалагинов А.Н., Андреев С.В., Волегов А.С.

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина

Волегов Алексей Сергеевич

a.a.golubiatnikova@urfu.me

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 °С, 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 быстроокаленный 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 °С. Время отжига – 1 час. Предельные петли магнитного гистерезиса отожженных образцов измерялись посредством вибрационного магнитометра КВАНС 1.

H_c исходного сплава марки MQR-B ≈ 10 кЭ. Полученные значения 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 $T = 700$ °С, добавка Gd-Cu-Co.

Полученные результаты показывают способ повышения H_c постоянных магнитов с использованием наиболее дешевых редкоземельных металлов.

Список публикаций:

[1] Akdogan O. et al. Superferrimagnetism in hard Nd-Fe-B thick films, an original concept for coercivity enhancement // Journal of Applied Physics. (2014) T. 115. – №. 17. – С. 17A764. [1].

Неоднородный магнитоэлектрический эффект в феррит-гранатовых плёнках типа (111)

Гриднева Гульназ Тимуровна

Вахитов Роберт Миннисламович, Юмагузин Азат Раисович

Уфимский университет науки и технологий

Вахитов Роберт Миннисламович

gulnaz.ahmadeeva2007@yandex.ru

Известно, что неоднородный магнитоэлектрический эффект, обнаруженный в пленках ферритов-гранатов при комнатных температурах, представляет собой явление смещения доменных границ (ДГ) под действием неоднородного электрического поля [1]. Он привлек к себе внимание исследователей возможностью его применения в устройствах магнитной памяти и системах обработки информации с низким энергопотреблением [2-4]. В этом случае зарождением, перемещением и трансформацией магнитных неоднородностей можно осуществить воздействием электрического поля. Дальнейшее изучение обнаруженного явления (флексомангнитоэлектрический эффект) выявило ряд особенностей, среди которых можно выделить существенную его зависимость от ориентации развитой поверхности пленки относительно кристаллографических осей. Если в (210)- и (011)-ориентированных пленках ферритов-гранатов он наблюдался, то в (111)-ориентированных пленках флексомангнитоэлектрический эффект (ФМЭ) не был обнаружен [3]. Было высказано предположение, что такая избирательность его проявления можно объяснить тем, что в (210)- и (011)-пленках имеется ромбическая составляющая наведенной одноосной анизотропии, которая способствует образованию 180° -ДГ с неблоховской структурой. Последнее обстоятельство может благоприятствовать возникновению ФМЭ в данных пленках. В то же время известно, что в (111) – ориентированной плёнке феррит-гранатов наведённая одноосная анизотропия не имеет ромбической компоненты. С другой стороны, согласно исследованиям [4], в таких пленках возможно существование 180° -ДГ с неблоховской структурой, но в определённых интервалах изменения параметров материала. Кроме того, теоретический анализ возможных магнитных неоднородностей в одноосных магнетиках показал, что наличие в них неоднородного магнитоэлектрического взаимодействия также приводит к выходу намагниченности из плоскости 180° -ДГ, т.е. ДГ становится неблоховской. Поэтому возникает необходимость в детальном изучении структуры ДГ в (111)-ориентированной пленке ферритов-гранатов и её трансформации под действием электрического поля.

Выражение для энергии исследуемого магнетика берётся в виде:

$$E = \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ A \left[\left(\frac{d\varphi}{dy} \right)^2 + \cos^2 \varphi \left(\frac{d\theta}{dy} \right)^2 \right] + K_u (\cos^2 \varphi \sin^2 \theta + \sin^2 \varphi) + \varepsilon_c + \varepsilon_{int} + 2 \pi M_s^2 \sin^2 \varphi \right\} dy \quad (1)$$

где θ и φ – соответственно, полярный и азимутальный углы вектора $\mathbf{M} = M_s \mathbf{m}$, A – обменный параметр, K_u – константа одноосной анизотропии, M_s – намагниченность насыщения, \mathbf{m} – единичный вектор намагниченности, ε_c – плотность энергии кубической анизотропии, ε_{int} – плотность энергии неоднородного магнитоэлектрического взаимодействия. Последние выражения имеют вид:

$$\varepsilon_c = K_1 (m_x^2 m_y^2 + m_x^2 m_z^2 + m_y^2 m_z^2) \quad (2)$$

$$\varepsilon_{int} = M_s^2 \varepsilon (b_1 \mathbf{m} \operatorname{div} \mathbf{m} + b_2 [\mathbf{m} \times \operatorname{rot} \mathbf{m}])$$

где K_1 – константа кубической анизотропии, b_1, b_2 – магнитоэлектрические постоянные, \mathbf{E} – напряженность электрического поля ($\mathbf{E} \parallel \mathbf{Oz}$).

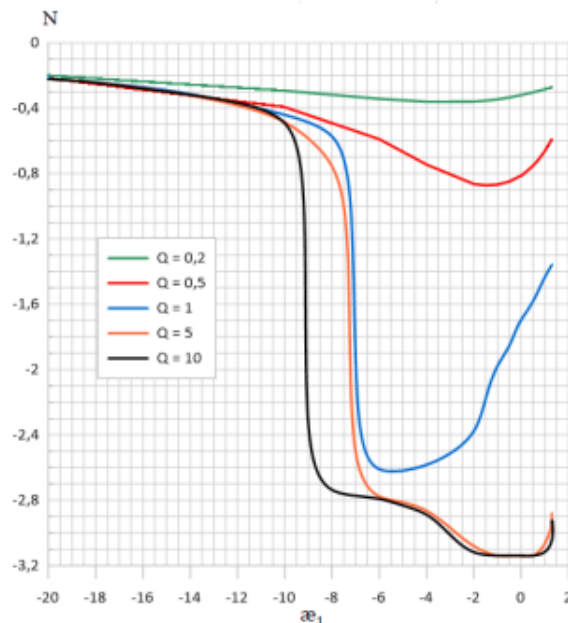


рис. 1. Зависимость интегральной поляризации от параметра α_1 для различных значений фактора качества Q при $\lambda = 0,3$

Анализ уравнений Эйлера–Лагранжа, соответствующие минимуму (1), в отсутствие электрического поля ($\mathcal{E} = 0$) показывает, что в (111)-ориентированной пленке ферритов-гранатов возможно существование двух типов 180° -ДГ, различающихся структурой и областью их устойчивости [4].

Первый тип представляет 180° -ДГ с блоховским распределением вектора \mathbf{m} : $\theta = \theta(y)$, $\varphi = 0, \pi, \psi = \pi k/3, k \in \mathbb{Z}$, а второй – с квазиблоховской структурой: $\theta = \theta(y)$, $\varphi = \varphi(y)$, $\psi = (2k + 1)\pi/6$, причём зависимость $\varphi = \varphi(y)$ является нечётной функцией. Их области существования на диаграмме устойчивых состояний в переменных " $Q - \alpha_1$ ", ($Q = K_u/2\pi M_s^2$ – фактор качества, $\alpha_1 = K_1/K_u$) граничат друг с другом, причём первый тип ДГ является устойчивым в основном при малых значениях Q , а второй тип – при больших Q . Следует отметить, что при действии электрического поля ($\mathcal{E} \parallel Oz$) на магнитоодноосную плёнку с флексомагнитоэлектрическим взаимодействием 180° -ДГ блоховского типа, согласно [6] преобразуются в 180° -ДГ с квазиблоховской структурой, в которой $\varphi = \varphi(y)$ является чётной функцией. Соответственно, при рассмотрении флексомагнитоэлектрических эффекта в (111) – ориентированной плёнке, как показывают расчёты, существенную роль на топологию 180° -ДГ играет три фактора: наведённая одноосная анизотропия (K_u), кубическая анизотропия (K_1) и неоднородное магнитоэлектрическое взаимодействие. Если первый и третий фактор приводят к тому, что $\varphi(y)$ является чётной функцией, то второй фактор приводит к нечётной функции. В результате зависимость $\varphi(y)$ становится функцией общего вида.

При действии электрического поля на первый тип ДГ он трансформируется в 180° -ДГ квазиблоховским распределением намагниченности \mathbf{m} . В данном случае график функции $\varphi(y)$ имеет асимметричную колокообразную форму. Это сказывается на распределении поляризации в области ДГ $p = p(y) = -\partial \varepsilon_{\text{int}} / \partial \mathcal{E}$, которая представляет двухвершинную кривую (с неравными пиками), расположенную в области отрицательных значений p . С возрастанием поля \mathcal{E} одбу из пиков усиливается, а второй ослабевает и затем исчезает. При этом величина интегральной поляризации P непрерывно увеличивается и достигает максимальных значений ($P \sim 3,15 P_0$, где $P_0 = M_s^2 b_0 / \Delta_0$, $\Delta_0 = \sqrt{A/K_u}$, $b_0 = b_1 + b_2$) при достаточно больших величинах поля \mathcal{E} ($\mathcal{E} \sim 4\mathcal{E}_0$, $\mathcal{E}_0 = 2K_u \Delta_0 / M_s^2 b_0$), что связано с малыми значениями Q ($Q \leq 0,05$), при которых она устойчива.

Второй тип ДГ при действии на него электрического поля также преобразуется так, что его топология становится достаточно сложной. В этом случае $\varphi = \varphi(y)$ с возрастанием поля претерпевает ряд структурных преобразований и, наконец, при некотором критическом поле \mathcal{E}_c (для $Q = 1$, $\alpha = -6$, $\mathcal{E}_c \sim 0,296 \mathcal{E}_0$) она скачком переходит в колокообразную асимметричную функцию. Соответственно, дифференциальная поляризация после соответствующих пертурбаций структура ДГ также становится подобной функцией. При этом интегральная поляризация (Рис.1) также скачком возрастает, а затем непрерывно переходит к своему предельному значению ($P \approx 3.15 P_0$). таким образом, из расчётов следует, что только при больших Q можно достичь предельного значения интегральной поляризации в малых полях ($\mathcal{E} \sim 0,3 \mathcal{E}_0$).

Работа выполнена при финансовой поддержке Государственного задания на выполнение научных исследований лабораториями (Приказ МН- 8/1356 от 20.09.2021)

Список публикаций:

- [1] Логгинов А.С., Мешков Г.А., Николаев А.В., Пятаков А.П. Магнитоэлектрическое управление доменными границами в пленке феррита-граната. Письма в ЖЭТФ, 2007, том 86, в.2, с.124–127
- [2] Пятаков А. П., Сергеев А. С., Николаева Е. П., Косых Т. Б., Николаев А. В., Звездин К. А., Звездин А. К. Микромагнетизм и топологические дефекты в магнитоэлектрических средах // УФН 185, 2015.с.1077–1088
- [3] Плавский В.В., Шамсутдинов М.А., Филиппов Б.Н. Структура и ориентация доменных границ в (111) – пластинах и кубических ферромагнетиков // ФММ. 1999. Т. 88. №3. С.22-29
- [4] Dzyaloshinskii I.E. Magnetoelectricity in ferromagnets // Europhys.Lett.2008.V.83.№6.P.67001(1-2)
- [5] A.S. Logginov, G. A. Meshkov, A. V. Nikolaev, E. P. Nikolaeva, A. P. Pyatakov, A.K.Zvezdin. Room temperature magnetoelectric control of micromagnetic structure in iron garnet films //Appl.Phys.Lett. 93, 182510, 2008
- [6] Р.М.Вахитов, Гареева З.В., Солонецкий Р.В., Мажитова Ф.А. Микромагнитные структуры, индуцированные неоднородным электрическим поле, в магнитоодноосных пленках с флексомагнитоэлектрическим эффектом // ФТТ. 2019. Т.61. №6. С. 1120-112

Изучение температурной зависимости коэрцитивной силы в области температуры магнитной компенсации в пластинах ферритов-гранатов

Гуляев Кирилл Евгеньевич

Мехоношин Дмитрий Сергеевич, Памятных Лидия Алексеевна

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина

Мехоношин Дмитрий Сергеевич

evilcows950@mail.ru

В работе исследованы гистерезисные свойства монокристаллической пластины-(111) феррита-граната $(\text{TbErGd})_2(\text{FeAl})_5\text{O}_{12}$ толщиной 50 мкм в диапазоне температур 77–350 К, включающем температуру магнитной компенсации ($T_k \approx 200\text{К}$) [1-2]. Петли магнитного гистерезиса пластины были измерены двумя независимыми методами: магнитометрическим и магнитооптическим. Прикладываемое магнитное поле направлено перпендикулярно плоскости пластины. Магнитометрические петли гистерезиса были измерены с помощью вибрационного магнитометра 7407 VSM Lake Shore Cryotronics (ЦКП «Современные нанотехнологии» УрФУ, оператор к.ф.-м.н. Кудюков Е.В.). Магнитооптические петли гистерезиса измерены на магнитооптической установке на основе эффекта Фарадея. Примеры петель гистерезиса пластины при $T = 193\text{ К}$ приведены на рис. 1. На основании полученных результатов построена зависимость коэрцитивной силы от температуры (рис.2.)

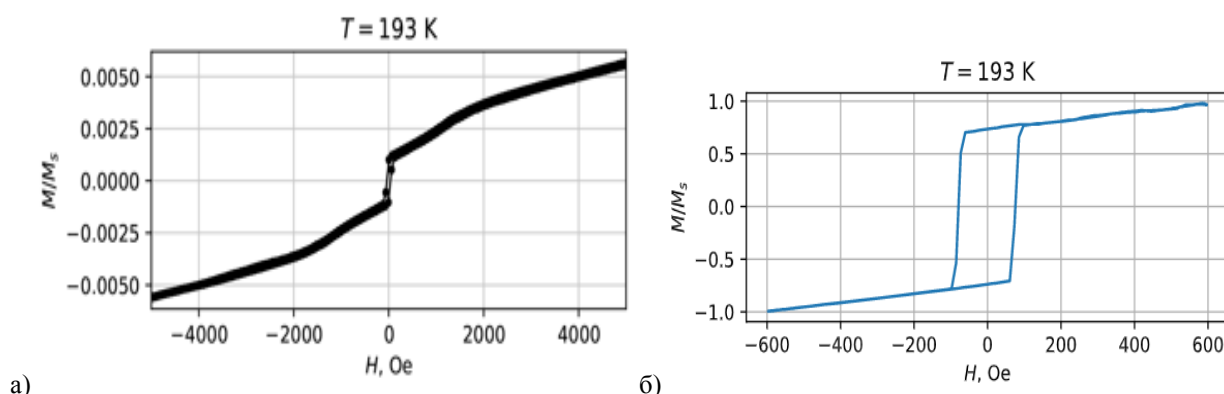


рис.1. Петли магнитного гистерезиса пластины феррита-граната вблизи температуры магнитной компенсации: магнитометрическая (а), магнитооптическая (б)

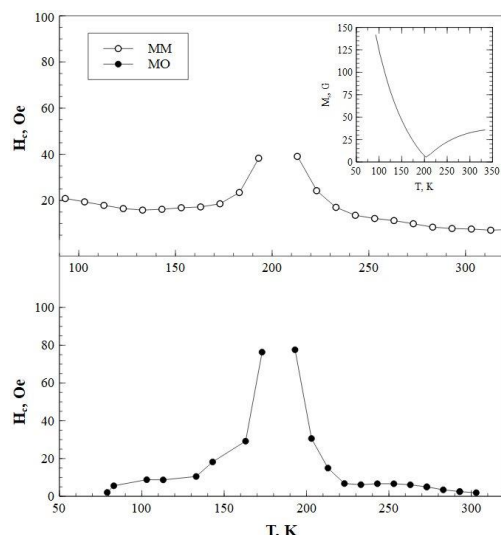


рис.2. Зависимости коэрцитивной силы пластины феррита-граната от температуры, полученные из измерений магнитометрических (ММ) и магнитооптических (МО) петель гистерезиса

Зависимости коэрцитивной силы от температуры, полученные из измерений магнитометрических и магнитооптических петель гистерезиса, имеют качественно подобный вид: H_c резко возрастает при приближении к T_k [3]. Выявленное различие значений T_k , полученное разными методами ($T_k = 200$ К - по магнитометрическим измерениям, $T_k = 180$ К - по магнитооптическим измерениям) может быть связано с тем, что магнитометрический метод является интегральным, в то время как при магнитооптических измерениях анализируется сигнал с некоторой локальной области кристалла.

Список публикаций:

- [1] Боровик Е.С., Еременко В. В. и Мильнер А.С. Лекции по магнетизму. 3-е изд., перераб. и доп. — М.: Физматлит, 2005.
 [2] Х. Вейн и Я. Смит. Ферриты: Физические свойства и практические применения. Москва: Издательство иностранной литературы, 1962.
 [3] Б.Ю. Соколов, М.З. Шарипов. Магнитооптические свойства феррита-граната $Tb_3Fe_5O_{12}$ в окрестности температуры магнитной компенсации. ФТТ. Т.56, вып. 5, С.939-943. 2014.

Разработка системы сбора энергии на магнитоэлектрическом эффекте

Зуева Екатерина Андреевна

Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого

Леонтьев Виктор Сергеевич

Ekaterina.Zueva@novsu.ru

В данной работе рассматривается блок-схема системы сбора энергии, работающая на основе магнитоэлектрического (МЭ) эффекта в композите на основе магнитострикционного материала и пьезоэлектрика.

Путем механических взаимодействий пьезоэлектрической и магнитострикционной подсистем обусловлено появление магнитоэлектрического эффекта в композиционных магнитострикционных-пьезоэлектрических структурах. Магнитоэлектрический эффект в слоистых магнитострикционно-пьезоэлектрических структурах является эффектом второго порядка.

Магнитоэлектрическая система сбора энергии относится к устройствам накопления и передачи энергии, работающим на основе применения магнитострикционно-пьезоэлектрических структур. Основой устройства для сбора и накопления энергии высокочастотного магнитного поля и механических колебаний является слоистая структура, которая состоит из скрепленных между собой магнитострикционного и пьезоэлектрического слоев.

Предлагаемая система сбора энергии предназначена для питания различных биомедицинских сенсоров и относится к области персонализированных медицинских помощников. Такая система сбора энергии относится к направлению повышения уровня энергоэффективности и область альтернативных источников энергии.

Магнитоэлектрическая система сбора энергии, состоит из приемного модуля, модуль управления, выпрямительного модуль и накопительного модуль, и чувствительного элемента (рис. 1).

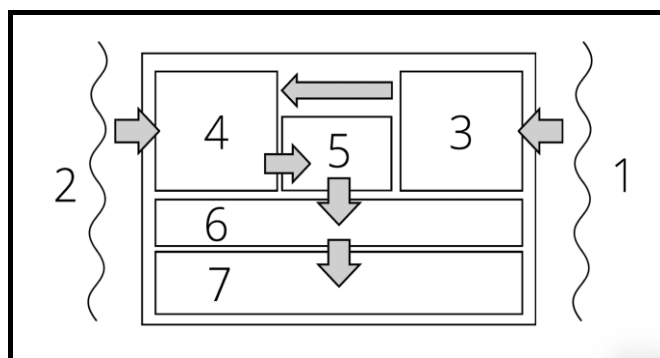


рис.1. Блок-схема работы системы сбора энергии.

На данной блок схеме представлены: 1 - внешняя высокочастотная электромагнитная энергия, 2 - внешняя механическая энергия, 3 - приемный модуль, 4 - модуль управления, 5 - чувствительный элемент, 6 - выпрямительный, 7 - накопительный модуль.

Чувствительным элементом таких систем является слоистая композитная структура. Слоистые композиционные магнитоэлектрические материалы состоят из магнитных и пьезоэлектрических материалов.

Предлагаемая структура работы позволяет получить следующий технический результат: собирать энергию механических колебаний и переменного магнитного поля, накапливать энергию и хранить. При этом структура устройства, выполненного в виде слоев, позволяет получить малые габариты прибора. Ключевая возможность применения устройства в диапазоне высоких частот и его малые массогабаритные характеристики являются основными техническими преимуществами, которые выгодно отличают его от аналогичных приборов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-25-20224, <https://rscf.ru/project/22-25-20224/>

Список публикаций:

[1] Пятаков А.П., Звездин А.К. Магнитоэлектрические материалы и мультиферроики // Успехи физических наук. – 2012. – т. 182 – № 6. – С. 593-620

[2] Wang, L. Energy harvesting by magnetostrictive material (MsM) for powering wireless sensors in SHM / L. Wang, F. G. Yuan // Proceedings of SPIE. —Vol. 6529. — 2007. — P. 652941.

Низкочастотная магнитоэлектрическая антенна

Иванов Сергей Вадимович

Соколов Олег Владимирович

Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого

Бичурин Мирза Имамович

sivanovvad@mail.ru

Низкочастотные антенны, передающие электромагнитные волны с частотой 10–30 (кГц), часто используются для передачи сигнала через земную и водную среду, исследования грунта и т.д. В качестве низкочастотных антенн с небольшими габаритными размерами можно использовать магнитоэлектрические (МЭ) композиты. Магнитоэлектрический композит – это система, в которой пьезоэлектрический и магнитоэлектрический материал механически соединены и для которой наблюдается прямой и обратный магнитоэлектрический эффект [1]. Ранее разработанные низкочастотные МЭ антенны, согласно [2], позволяют реализовать передачу сигнала при расстоянии 120 (м) между передающей и принимающей антеннами при 80 (В) напряжения, прикладываемого к передающей антенне.

Принцип работы передающей МЭ антенны основан на обратном МЭ эффекте, а принимающей на прямом МЭ эффекте [1]. Частота переменного напряжения, подаваемого на передающую антенну равна резонансной частоте используемого композита. В таком случае напряжение, генерируемое принимающей антенной максимально.

Для измерения диаграммы направленности низкочастотных антенн, основанных на прямом и обратном МЭ эффекте, были разработаны два симметричных трехслойных композита Метглас / ЦТС-19 / Метглас с размерами 70*12*0,7 (мм). Три пленки Метгласа толщиной 20 (мкм), шириной 12 (мм) и длиной 65 (мм) были соединены с верхней и нижней гранями пластинки ЦТС-19 с толщиной 0,5 (мм), шириной 12 (мм) и длиной 70

(мм) с помощью клея БФ-2. Постоянное магнитное поле для линейризации МЭ эффекта подавалось на композиты с помощью постоянного цилиндрического магнита. Величина постоянного магнитного поля была равна 15 (Э) т.к. при таком значении наблюдалось максимальная амплитуда напряжения на принимающей антенне.

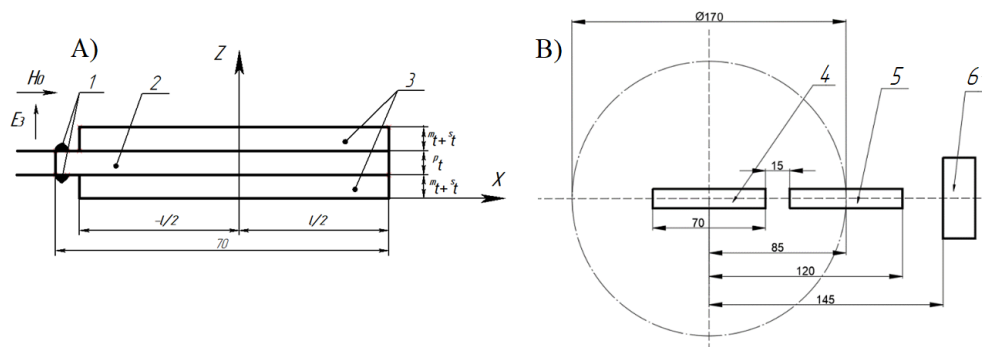


рис. 1 – Эскиз разработанного МЭ композита, используемого в качестве низкочастотной антенны (А), эскиз измерения диаграммы направленности МЭ антенны в Е плоскости (В).

На рисунке 1: 1 – электроды для подачи напряжения на передающую антенну и подключения осциллографа к принимающей антенне для измерения генерируемого напряжения, 2 – пьезоэлектрическая фаза (ЦТС-19), 3 – магнитострикционная фаза (Метглас), $H_0 = 15$ (Э) – внешнее постоянное подмагничивающее поле, E_3 – напряженность электрического поля, приложенного к пьезоэлектрической фазе передающей антенны, $l=65$ (мм) – длина магнитострикционной фазы, 4 - передающая антенна, 5 - принимающая антенна, 6 - постоянный магнит.

$m_t = 0,06$ (мм), $p_t = 0,5$ (мм); $s_t = 0,04$ (мм) – толщина магнитострикционной, пьезоэлектрической и клеевой фаз композита соответственно. Резонансная частота разработанных МЭ композитов составила 23,8 (кГц).

Амплитуда синусоидального переменного напряжения, приложенного к пьезоэлектрической фазе МЭ композита передающей антенны: $U = 10$ (В), частота синусоидального переменного напряжения: 23,8 (кГц).

Для измерения коэффициента направленности антенн было измерено напряжение на принимающей антенне, которая перемещалась против часовой стрелки относительно передающей антенны. Схема измерения диаграммы направленности представлена на рисунке 1 (В). Постоянный магнит при вращении принимающей антенны находился в одном положении, указанном на рисунке 1 (В).

Коэффициент направленности антенны рассчитывался по формуле:

$$K_i = \frac{U_i}{U_{max}} \quad (1)$$

где U_i – напряжение на принимающей антенне при определенном угле поворота относительно передающей антенны, В; $U_{max} = 30$ – максимальное измеренное значение напряжения на принимающей антенне при измерении диаграммы направленности в Н и Е плоскости, В.

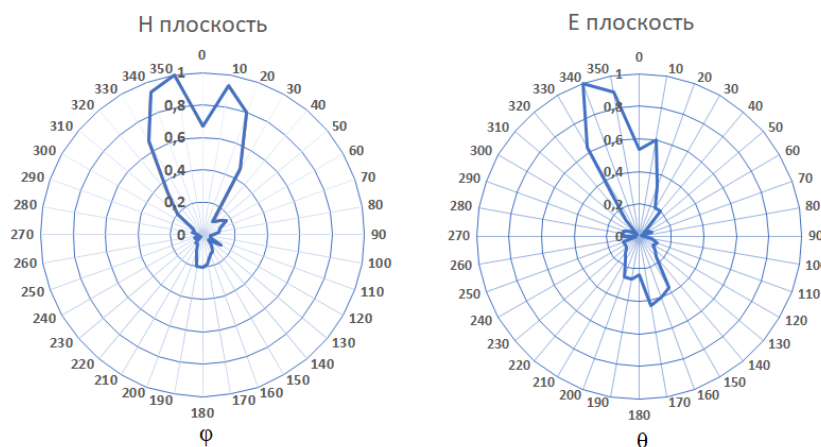


рис. 2 – Измеренные диаграммы направленности МЭ антенн в Е и Н плоскостях. φ – угол поворота принимающей антенны относительно передающей в Н плоскости, θ – угол поворота принимающей антенны относительно передающей в Е плоскости.

Небольшое расстояние между МЭ антеннами обусловлено низким значением передаваемой мощности между антеннами. Это связано с низкой добротностью резонанса разработанных композитов, которая равна $Q = 25$, и низким значением магнитострикции насыщения применяемого Метгласа, которая равна $\lambda_s \approx 2$ (ppt). Для улучшения эффективности передачи мощности между антеннами необходимо уменьшить толщину клеевой фазы МЭ композитов, применять магнитострикционный материал с высоким значением магнитострикции насыщения для увеличения механических деформаций в ходе прямого и обратного МЭ эффектов, что в свою очередь приведет к возрастанию значения генерируемого напряжения в пьезоэлектрической фазе композитов.

Список публикаций:

[1] М.И. Бичурин, В.М. Петров, Д.А. Филиппов, Г. Сринивасан *Магнитоэлектрический эффект в композиционных материалах*; НовГУ им. Ярослава Мудрого. – Великий Новгород, 2005. – 231 с.

[2] Cunzhen Dong, Yifan He, Menghui Li, Cheng Tu, Zhaoqiang Chu, Xianfeng Liang, Huaihao Chen, Yuyi Wei, Mohsen Zaeimbashi, Xinjun Wang, Hwaider Lin, Yuan Gao, and Nian X. Sun. *A Portable Very Low Frequency (VLF) Communication System Based on Acoustically Actuated Magnetolectric Antennas*. *IEEE ANTENNAS AND WIRELESS PROPAGATION LETTERS*, VOL. 19, NO. 3, MARCH 2020.

Терромагнитная обработка аморфного сплава для магнитоэлектрических применений

Ивашева Елена Евгеньевна

Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого

Бичурин Мирза Имамович, д.ф.-м.н.

ellen9879@yandex.ru

В последнее время много публикаций посвящено изучению магнитоэлектрического (МЭ) эффекта в структурах из магнитострикционных и пьезоэлектрических материалов. Прямой МЭ эффект основан на том, что происходит индуцирование электрической поляризации во внешнем переменном магнитном поле в присутствии подмагничивающего поля.

Одним из основных применений магнитострикционно-пьезоэлектрических МЭ структур являются различные датчики, например, магнитного поля (магнитометры). Улучшение свойств материалов, из которых состоит МЭ композит, позволит повысить эффективность устройств на их основе, например, сделать магнитометры более чувствительными к изменению магнитного поля.

Оптимизацию МЭ структуры возможно реализовать, например, с помощью терромагнитной обработки магнитострикционного материала, в качестве которого может выступать магнитомягкий сплав, имеющий аморфную структуру. Материал, находясь под воздействием высокой температуры и влиянием внешнего магнитного поля, начинает менять свою внутреннюю структуру – происходит процесс кристаллизации, и, таким образом, возможно получение «однодоменной» структуры.

Ранее нами проводилось исследование влияния термической обработки аморфного сплава АМАГ493 (ПАО «Мстатор», г. Боровичи) на МЭ эффект в магнитострикционно-пьезоэлектрических структурах [1]. В результате было получено, что увеличение МЭ коэффициента по напряжению при воздействии температуры на аморфный сплав составляет около 70% (рис. 1).

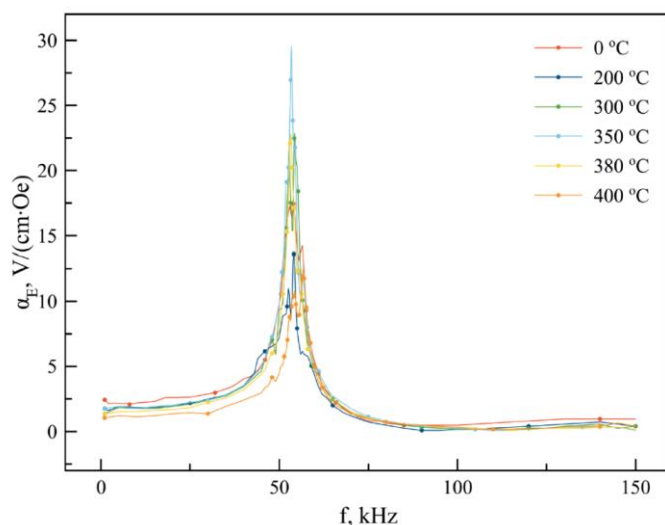


рис.1. Зависимость магнитоэлектрического коэффициента по напряжению от частоты

На (рис.1) представлена зависимость магнитоэлектрического коэффициента по напряжению от частоты при различных температурах обработки аморфного сплава АМАГ493.

В настоящий момент нами ведется разработка установки для термомагнитной обработки, в которой планируется подвергать аморфный сплав АМАГ493 термической обработке во внешнем магнитное поле. Дальнейшие исследования будут направлены на изучение влияния такой обработки на МЭ эффект в магнитоэлектрических структурах. Планируется подробное изучение магнитных свойств аморфного сплава, подбор оптимального режима термообработки, величины внешнего магнитного поля.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-25-20224, <https://rscf.ru/project/22-25-20224/>.

Список публикаций:

- [1] *Ивашева Е.Е., Леонтьев В.С., Бичурин М.И., Колецов В.В. Применение термообработки для оптимизации магнитоэлектрической компоненты магнитоэлектрического композита // Дни калорики в Королеве: функциональные материалы и их приложения: сб. тез. 3-го Междунар. науч. семинара. – Челябинск: Изд-во Челяб. гос. ун-та, 2022. – С.103-105.*
- [2] *Бичурин М.И., Петров Р.В., Соловьев И.Н., Соловьев А.Н. Исследование магнитоэлектрических сенсоров на основе пьезокерамики ЦТС и Метгласа // Современные проблемы науки и образования – 2012. - №1*
- [3] *Bichurin M.I., Petrov V.M. Modeling of magnetoelectric effects in composites. Springer Series in Materials Science. Vol. 201. Springer, New York, 2014. 108 p.*

Структура и свойства кл-скирмионов в ферромагнитных пленках с колумнарным дефектом

Ильясова Галия Флюсовна

Вахитов Роберт Миннисламович, Солонецкий Ростислав Владимирович

Уфимский университет науки и технологий

Вахитов Роберт Миннисламович

galiya.siraeva2014@yandex.ru

В настоящее время наблюдается устойчивый интерес к исследованиям, касающихся магнитных скирмионов: их возможных типов, свойств, магнитных материалов, в которых они стабилизируются и т.д. Такое внимание к ним объясняется не только перспективами их применения в устройствах спинтроники, но и их необычными свойствами, которые демонстрируются в различных работах [1]. Впервые магнитные скирмионы были обнаружены в киральных магнетиках, в которых благодаря наличию взаимодействия Дзялошинского-Мория, они образуют устойчивые состояния [2]. В большинстве последующих исследований под магнитными скирмионами понимались вихреподобные неоднородности, в которых единичный вектор намагниченности \mathbf{m} поворачивается на 180° при изменении радиальной переменной r от 0 до \square (π -скирмионы). В то же время, появились исследования в которых предсказывалась возможность существования кл-скирмионов ($k \in 1, 2, 3...$) [3].

В связи с тем, что в киральных магнетиках [4] появились определенные проблемы с устойчивостью магнитных скирмионов, возник спрос на альтернативные методы их стабилизации в других материалах, в которых отсутствует взаимодействие Дзялошинского - Морья. Одним из возможных способов реализации такого подхода был предложен в работах [4,5] в которых было показано, что такими магнетиками могут являться ферромагнитные пленки с пространственно модулированной одноосной анизотропией. В дальнейшем было установлено (как экспериментально [4], так и теоретически [5]), что магнитные скирмионы могут существовать в таких материалах в широком диапазоне изменения температур и магнитных полей.

В данной работе изучаются устойчивые состояния магнитных кл-скирмионов, образующихся на колумнарных дефектах типа «потенциальная яма» в одноосных ферромагнитных пленках [5]. Подобные исследования в некиральных магнетиках до сих пор практически не проводились, за исключением работы [6], в которых исследовалось влияние магнитного поля на кл-скирмионы, ($k \in 2,3,4$), возникающие в магнитных нанодисках Fe_3Sn_2 . В качестве модели дефекта рассматривается структурная неоднородность магнетика, в которой материальные параметры $P = \{A, K_u, M_s\}$, изменяются скачком в области дефекта:

$$P = \begin{cases} P_1, r > R_0 \\ P_2, r \leq R_0 \end{cases}, \quad (1)$$

где $P_i = \{A_i, K_{ui}, M_{si}\}$ — материальные параметры вне колумнарного дефекта ($i = 1$) и в области дефекта ($i = 2$). Здесь A —обменный параметр, K_u ,-константа одноосной анизотропии, M_s -намагниченность насыщения.

Численный анализ интегро-дифференциального уравнения Эйлера–Лагранжа, описывающего распределение намагниченности в области дефекта с учетом энергии магнитных неоднородностей [5], позволяет найти распределение намагниченности \mathbf{m} $k\pi$ -скирмионов (рис.1) в области колумнарного дефекта и его характеристики: характерные размеры магнитной неоднородности и ее энергию. Из приведенных расчетов структуры и устойчивости $k\pi$ -скирмионов следует, что они могут существовать как устойчивые образования в магнитоодноосных пленках на колумнарных дефектах типа потенциальная яма. Топология и размеры этих неоднородностей существенно зависят от характеристик дефекта (A_2 , K_{u2} , M_{s2} , R_0) и прежде всего от его радиуса R_0 и глубины потенциальной ямы K_{u2} . Можно отметить, что начальные профили распределения намагниченности (когда угол поворота вектора \mathbf{m} вокруг радиальной оси $(0,r)$ меняется от 0 до π) для всех трех типов $k\pi$ -скирмионов ($k \in 1,3,5$) совпадают друг с другом вне зависимости от R_0 . Исследования показывают, что энергетически более выгоден π -скирмион, а $3\pi, 5\pi$ - скирмионы существуют как метастабильные состояния. При этом нижний порог устойчивости π -скирмионов относительно размеров дефекта начинается с малых ρ_0 ($\rho_0 \geq 1$), 3π -скирмионов- с больших ρ_0 ($\rho_0 \geq 14$), а 5π -скирмионов- со значительно больших ρ_0 ($\rho_0 \geq 25$), где $\rho_0 = R_0/\Delta_0$, $\Delta_0 = \sqrt{A_1/K_{u1}}$.

Согласно расчетам, область устойчивости практически не зависит от величины намагниченности насыщения в области дефекта M_{s2} . В то же время, исследования показывают, что обменный параметр в области дефекта A_2 оказывает большее влияние на границу области устойчивости: при его понижении (по сравнению с A_1) кривая $Q = Q_1(\rho_0)$, характеризующая нижнюю границу области по Q смещается вниз. Такое поведение кривой в зависимости от A_2 объясняется тем, что уменьшение влияния обменного взаимодействия приводит к усилению вклада магнитоэлектростатических полей в общую энергию магнетика, что сказывается на области устойчивости скирмионов.

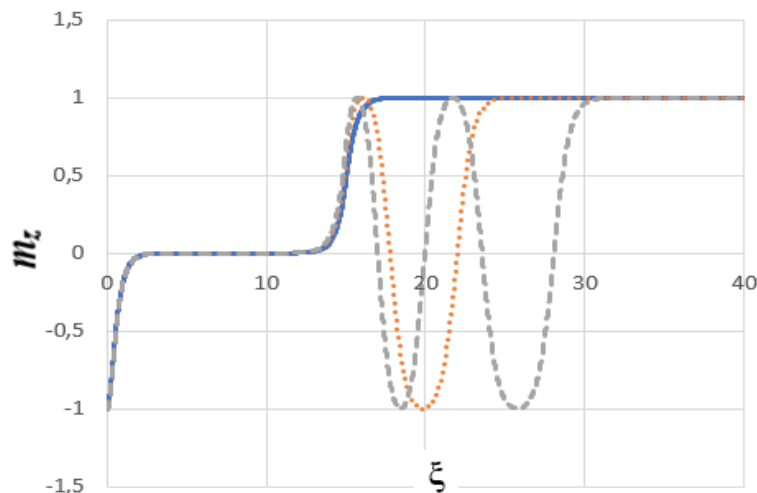


рис. 1. Распределение намагниченности $k\pi$ -скирмионов, в зависимости от приведенной координаты $\xi = r/\Delta_0$ при следующих значениях параметров материала, $K_{u2} = -4K_{u1}$, $L = 15$, $Q = 100$, $A_2 = A_1$, $M_{s2} = M_{s1}$. Здесь сплошная линия соответствует π -скирмиону, точечная линия - 3π -скирмиону, штриховая - 5π -скирмиону.

Список публикаций:

- [1] K. Everschor-Sitte, J. Masell, R.M. Reeve, et al, *J. Appl. Phys.* 124, 240901 (2018);
- [2] S.Muhlbauer, V.Binz, F.Jonetz, A.Neubauer, *Georgii, Science*, 323, 915 (2009).
- [3] Julian Hagemester, Ansgar Siemens, Levente Rózsa, Elena Y. Vedmedenko, and Roland Wiesendanger *Phys. Rev. B* 97, 174436 (2018)
- [4] M. V. Sapozhnikov, S. N. Vdovichev, O. L. Ermolaeva, N. S. Gusev, A. A. Fraerman, S. A. Gusev, Y. V. Petrov, *Appl. Phys. Lett.*, 109, 042406 606 (2016).
- [5] R. M. Vakhitov, R.V. Solonetsky, A. A. Akhmetova, *J. Appl. Phys.*, 128, 000000 (2020)
- [6] Jialiang Jiang, Yaodong Wu, Lingyao Kong, Yihao Wang, Junbo Li, Yimin Xiong, *Jin Tang Acta Materialia*, 215 (2021) 117084

Моделирование микрополоскового СВЧ магнитоэлектрического фазовращателя

Кафаров Руслан Гайдарович

Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого

Лобекин Вячеслав Николаевич

evraudx14@gmail.com

Сочетание физических свойств пьезоэлектриков и ферритов позволяет использовать их в различных приборах, одним из которых является фазовращатель. Теоретический расчёт сложных устройств можно заменить компьютерным моделированием, что упрощает разработку рекомендаций по выбору параметров подобных устройств, а также уменьшает необходимость в экспериментальных исследованиях.

Принцип действия фазовращателя основан на микроволновом магнитоэлектрическом эффекте (МЭ), заключающемся в сдвиге линии ферромагнитного резонанса (ФМР) из-за механического взаимодействия ферритовой и пьезоэлектрической компоненты. На диэлектрической подложке из алюмооксидной керамики, $\varepsilon = 9.8$, $tg\delta = 1 \cdot 10^{-4}$, формируется микрополосковая линия передачи с волновым сопротивлением 50 Ом и два шлейфа длиной $\lambda_{\pi}/8$ и $3\lambda_{\pi}/8$ для создания области круговой поляризации магнитного поля, в которую помещается МЭ резонатор, состоящий из железо-иттриевого граната (ЖИГ) и пластины цирконата титаната свинца (ЦТС) или ниобата титаната магния (НТМ) [1]. Геометрические размеры шлейфов влияют на частоту резонанса устройства f_r и определяются выражением (1):

$$f_r = \frac{\lambda_{\pi}}{c} = \frac{\lambda_0}{c\sqrt{\varepsilon_{\varepsilon}(f)}} \quad (1)$$

где λ_{π} – длина волны в линии, c – скорость света, λ_0 – длина волны в свободном пространстве, $\varepsilon_{\varepsilon}(f)$ – эффективная диэлектрическая проницаемость с учётом частотной дисперсии.

Волновое сопротивление является функцией от частоты, благодаря чему имеется гибкость в выборе частоты резонанса устройства и волнового сопротивления на частоте фазового сдвига для лучшего согласования.

Для получения фазового сдвига к пьезоэлектрику прикладывается внешнее электрическое поле, но в Ansys HFSS отсутствует возможность расчёта механических деформаций, поэтому сдвиг резонансного поля ЖИГ назначается вручную в соответствии с теорией или экспериментом согласно выражению $\delta H = AE$. На практике для композита ЖИГ-ЦТС сдвиг составляет около 2–4 МГц/кВ·см или 0.1–0.2 Э·см/кВ при ширине линии ФМР ΔH 1–2 Э [2]. На (Рис. 1) представлена компьютерная модель фазовращателя.

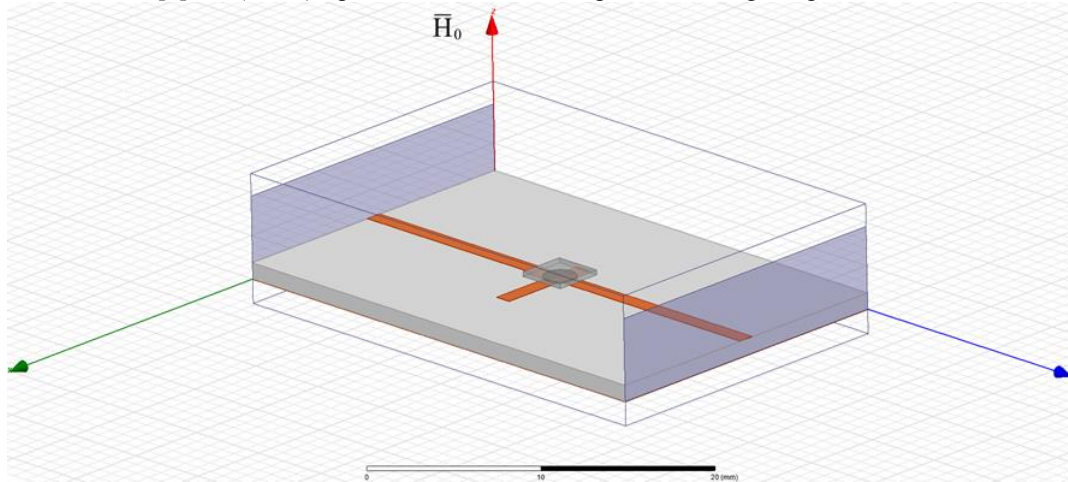


рис. 1. Модель фазовращателя с МЭ резонатором ЖИГ/ЦТС, подмагничивающее поле $\overline{H_0} = 2900$ Э направлено вдоль оси OZ, резонанс устройства на частоте 6.55 ГГц.

При моделировании использовался монокристаллический ЖИГ с шириной линии ФМР 3 Э и намагниченностью насыщения 1750 Гс. Диаметр диска ЖИГ 1 мм, толщина 0.1 мм. Стороны ЦТС 3 мм, толщина 0.3 мм. В результате моделирования был получен график зависимости сдвига фазы от сдвига линии ФМР на 2 Э в формате $S_{2,1}(\varphi, f)$ (Рис. 2), что соответствует приложению к ЦТС электрического поля $E \sim 10$ кВ/см.

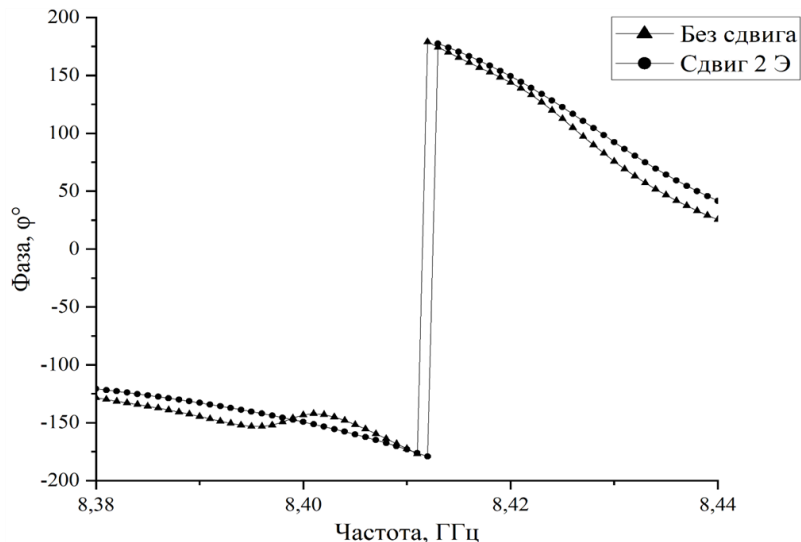


рис.2. Значения фазы волны до и после сдвига линии ФМР на 40 МГц, потери в фазовращателе составляют 4-5 дБ, сдвиг фазы на частоте 8.43 ГГц составил $\sim 16^\circ$.

В ходе работы проведено компьютерное моделирование фазовращателя на МЭ эффекте. Можно сделать вывод, что на величину сдвига фазы влияют ширина и сдвиг линии ФМР и размеры ЖИГ. Полученный сдвиг фазы оказался небольшим из-за малого сдвига линии ФМР. Компьютерное моделирование позволяет подобрать нужные параметры таких устройств без реального эксперимента.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФ в рамках научного проекта № 22-29-00950.

Список публикаций:

- [1] Бичурин М.И., Петров Р.В., Татаренко А.С. МАГНИТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВЧ УСТРОЙСТВА ДЛЯ ФАР // *Современные проблемы науки и образования*. – 2011. – № 4.
 [2] Никитин А.О. Симуляция магнитоэлектрической структуры в СВЧ диапазоне // *Вестн. Новг. гос. ун-та. Сер.: Технические науки*. 2018. № 3 (109). С.27–31. Библиогр. 11 назв.

Система измерения постоянных токов на основе тороидальной магнитоэлектрической структуры

Марков Иван Юрьевич

Ивашева Елена Евгеньевна

Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого

Бичурин Мирза Имамович, д.ф.-м.н.

ivanmarckov02@mail.ru

Магнитоэлектрический (МЭ) эффект в магнитоэлектрических структурах может быть использован при проектировании различных устройств для измерения физических величин [1]. МЭ структуры прямоугольной, квадратной или дисковой геометрии подходят только для измерения магнитных полей фиксированного направления. Для измерения тока, текущего по проводнику, идеально подходит замкнутая тороидальная структура. Данная структура открывает широкие возможности для проектирования различных магнитоэлектрических систем, например, бесконтактных датчиков больших постоянных токов с беспроводной передачей данных.

Были проведены эксперименты с пятью тороидальными структурами, отличающиеся только количеством склеенных слоев Метгласа (аморфный магнитомягкий сплав АМАГ225, ПАО «Мстатор», Россия). В качестве пьезоэлектрической фазы использовалось пьезокерамическое кольцо ЦТС-19 с поперечной поляризацией и толщиной 1 мм. Образцы имеют одинаковую ширину стенки 2,5 мм и средний диаметр 5,5 мм. МЭ структуры получались путем склеивания с помощью клея БФ-2 от одного до пяти магнитоэлектрических слоев Метгласа (толщина одного слоя 20 мкм) как сверху, так и снизу кольца ЦТС-19 для создания симметричной структуры. Выводы для снятия выходного напряжения были припаяны на магнитоэлектрическую фазу с двух сторон. Вдоль структуры была намотана медная катушка индуктивности.

Исследование проводилось с помощью синхронного усилителя MFLI Lock-in Amplifier (Zurich Instruments), который включает в себя генератор сигналов и осциллограф для снятия выходного сигнала, и

источник питания АКТАКОМ APS-3203. Принцип эксперимента состоит в следующем: на катушку индуктивности подается синусоидальный сигнал с усилителя, в результате чего возбуждается переменное магнитное поле. Через отверстие тороидальной структуры пропускают прямолинейный проводник с током, подключенный к источнику питания. Вокруг проводника возникает постоянное магнитное поле. В результате воздействия переменного и постоянного магнитных полей на структуру возникает прямой МЭ эффект и на выводах образца индуцируется электрический сигнал, который снимается с помощью осциллографа.

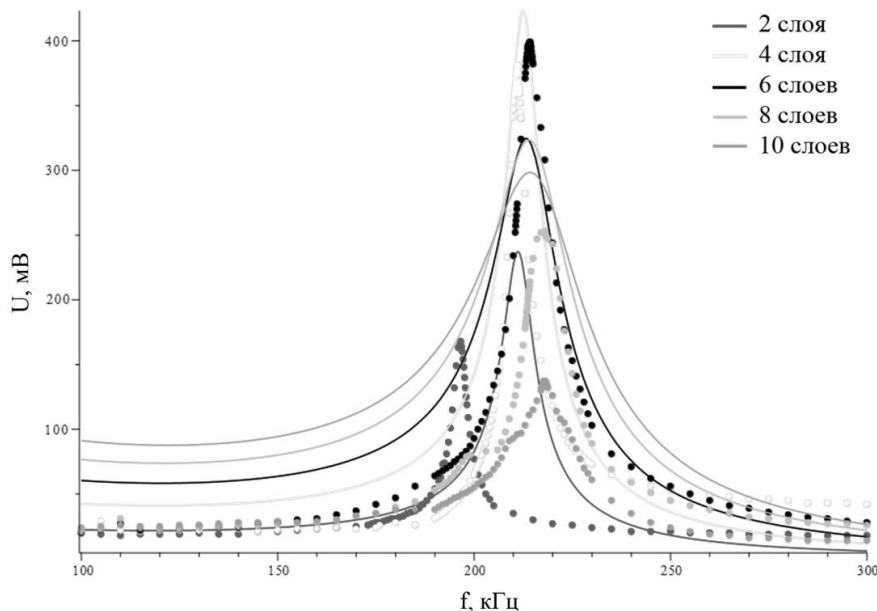


рис.1. Зависимость выходного напряжения от частоты подаваемого переменного сигнала

На (рис.1) представлены полученные экспериментальные (обозначены точками) и теоретические (обозначены сплошными линиями) зависимости выходного напряжения от частоты для образцов с разным количеством слоев Метгласа при силе тока 1 А в проводнике. Данное исследование показывает, что резонансной частотой можно управлять, изменяя объемную долю магнитострикционного материала в композитной структуре. Максимальное выходное напряжение наблюдается при трех слоях Метгласа как сверху, так и снизу кольца ЦТС-19.

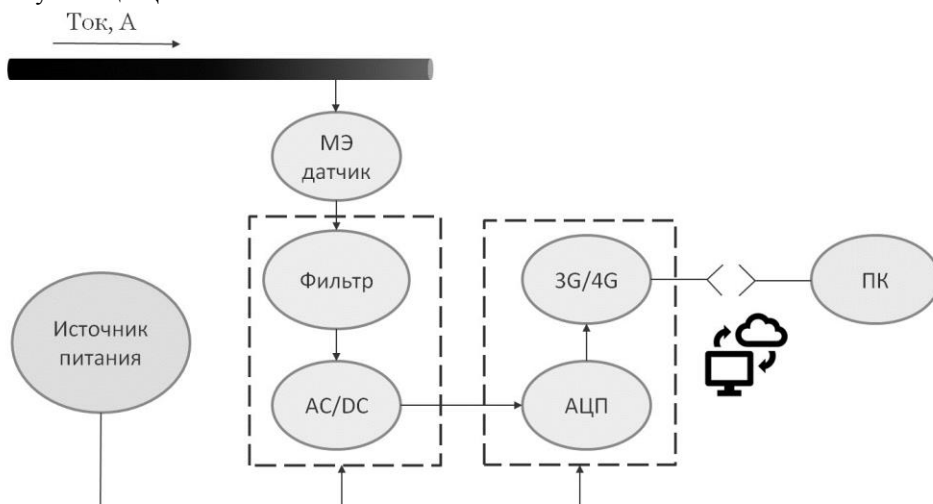


рис.2. Структурная схема бесконтактной МЭ системы измерения токов

Благодаря замкнутой геометрии тороидальной структуры появляется возможность измерять большие токи с малой относительной погрешностью, поэтому исследование данных структур позволит в будущем использовать их в качестве МЭ датчика тока при реализации бесконтактной системы измерения малых и больших постоянных токов на основе МЭ эффекта. Предлагаемая структурная схема такой системы изображена на (рис. 2).

В результате проведенного экспериментального исследования было выявлено оптимальное количество слоев Метгласа, при котором выходное напряжение достигает максимального значения. Планируется исследовать тороидальные структуры с использованием никель-цинковых ферритов вместо тонкослойного Метгласа с целью увеличения МЭ эффекта и реализовать макет бесконтактной МЭ системы измерения токов.

Список публикаций:

[1] Бичурин М.И., Петров Р.В., Соловьев И.Н., Соловьев А.Н. Исследование магнитоэлектрических сенсоров на основе пьезокерамики ЦТС и Метгласа // Современные проблемы науки и образования – 2012. - №1

Поведение 0° градусных доменных границ в магнитоодноосных пленках с флексомагнитоэлектрическим эффектом во внешнем магнитном поле

Низямова Алина Рамилевна

Вахитов Роберт Миннисламович, Солонецкий Ростислав Владимирович

Уфимский университет науки и технологий

Вахитов Роберт Миннисламович

alya.nizyamova.96@mail.ru

В настоящее исследование магнитоэлектрических явлений в магнитных материалах вызывают повышенный интерес, что связано с возможностью их применения при создании различных устройств спинтроники с низким энергопотреблением [1]. Одним из таких эффектов, привлекший внимание многих исследователей, стало обнаруженное в пленках ферритов-гранатов явление смещения доменных границ (ДГ) под действием неоднородного электрического поля [2] (флексомагнитоэлектрический эффект (ФЭ) [1]). Последовавшие за ним исследования этого эффекта выявили новые аспекты его проявления и, в частности, было установлено, что на ФЭ существенное влияние оказывает магнитное поле, которое при определенных условиях может привести к его усилению [3,4]. В данной работе теоретически изучается влияние магнитного поля на микромагнитные структуры типа 0° -градусных ДГ в одноосных пленках с неоднородным магнитоэлектрическим взаимодействием, плотность энергии ε которой берется в виде [3]

$$\varepsilon = M_s^2 \varepsilon (b_1 m \operatorname{div} m + b_2 (m \times \operatorname{rot} m)),$$

где b_1, b_2 - магнитоэлектрические постоянные, M_s - намагниченность насыщения, m – единичный вектор намагниченности, ε – электрическое поле ($\mathbf{E} \parallel \mathbf{Oz}$). Кроме того в энергии изучаемого магнетика E учитываются обменное взаимодействие (характеризуемое обменным параметром A), одноосная анизотропия (K_u), зеемановское взаимодействие ($\varepsilon_H = -M_s \mathbf{m} \mathbf{H}$, \mathbf{H} – внешнее магнитное поле) и размагничивающие поля в винтеревском приближении [3].

Анализ уравнений Эйлера-Лагранжа, соответствующих энергии E , показывает, что их решениями в отсутствие магнитного поля являются не только 180° ДГ, но 0° ДГ с квазиблоховской структурой и 0° ДГ неелевского типа [4], причем возможность существования 0° ДГ первого типа носит пороговый характер, т.к. он возникает при значении электрического поля, превышающего некоторое критическое: $\varepsilon > \varepsilon_n$. При этом второй тип 0° ДГ может зарождаться в любом поле $\varepsilon > 0$, но только в неоднородном электрическом поле. Согласно расчетам в обоих случаях в окрестности ДГ индуцируются связанные заряды (поляризация), однако в первом случае их интегральная величина N (суммарный заряд стенки) отлична от нуля, а во втором случае – равна нулю ($N=0$), т.к. имеет место взаимная экранировка зарядов. Наличие магнитного поля приводит к тому, что для каждого типа микромагнитных структур всегда существует такое направление поля \mathbf{H} , при котором возрастает интегральная величина поляризации стенки. Последнее означает усиление проявления флексомагнитоэлектрического эффекта в исследуемом магнетике.

Наиболее существенное (многократное) усиление эффекта будет иметь место при действии на 180° ДГ электрических и магнитных полей в следующей геометрии: $\mathbf{E} \parallel \mathbf{Oz}$, $\mathbf{H} \parallel \mathbf{Oy}$, причем наибольший эффект усиления можно достичь уже в малых полях. Это согласуется с экспериментальными данными [5,6], из которых следует, что наибольшее смещение ДГ в неоднородном электрическом поле происходит при действии магнитного поля, перпендикулярного плоскости стенки. В случае 0° ДГ квазиблоховского типа такой эффект можно достичь в слабых магнитных полях, направленных вдоль \mathbf{Oz} . Однако при этом значение электрического поля должно быть не малым: $\lambda > 1.5$, где $\lambda = \varepsilon / \varepsilon_0$, $\varepsilon_0 = 2\sqrt{AK_u / M_s^2} b$ – характерная величина электрического поля. В обоих случаях эффект увеличения значения интегральной поляризации N достигается за счет возрастания величины угла выхода вектора намагниченности из плоскости ДГ.

Если внешнее магнитное поле с $\mathbf{H} \parallel \mathbf{Ox}$ действует на 0° ДГ неелевского типа, то тогда также возникает флексомагнитоэлектрический эффект ($N \neq 0$), достаточный для его наблюдения в экспериментальных условиях.

Однако такое можно достичь лишь в больших электрических ($\lambda \sim 1,5-2$) и магнитных ($h \sim 1-1,5$) полях. Здесь $h = H/H_u$, $H_u = 2K_u/M_s$ – поле одноосной анизотропии. Механизм возникновения интегральной поляризации в данном случае более сложный, т.к. в него вносят вклады парциальных частей НМЭВ, содержащих как *divm*, так и *rotm*. Очевидно, на первую часть НМЭВ влияет трансформации в структуре неелевской 0° ДГ, вызванные действием плоскостного магнитного поля (точнее, изменения в зависимости $\varphi = \varphi(\xi)$), а на вторую часть – отклонения магнитных моментов от плоскости yOz под действием приложенного поля, что обуславливает появление зависимости $\theta = \theta(\xi)$ (в отсутствии поля $\theta = 0$). Следует отметить, что действием магнитного поля на 0° ДГ квазиблоховского типа можно изменить критическое поле зарождения ε_n , в ту или иную сторону. Более того, переключением ориентации магнитного поля на противоположное можно достичь того, чтобы отсутствовал порог зарождения такого типа 0° ДГ, т.е. $\varepsilon_n = 0$. Эти и другие полученные результаты позволяют утверждать, что внешним магнитным полем можно эффективно регулировать процессами зарождения и трансформацией микромагнитных структур в магнитоодноосных пленках в неоднородном электрическом поле, а также влиять на характер проявления флексомагнитоэлектрического эффекта в них.

Работа выполнена при финансовой поддержки Государственного задания на выполнение научных исследований лабораториями (Приказ МН- 8/1356 от 20.09.2021)

Список публикаций:

- [1]. А.П. Пятаков, А.К. Звездин, УФН, 182, 593-620 (2012)
 [2] Logginov A.S., Meshkov G.A., Nikolaev A.V., Nikolaeva E.P., Pyatakov A.P., Zvezdin A.K. *App. Phys. Lett.*, 93, 182510, (2008)
 [3] А.П. Пятаков, А.С.Серегеев, Е.П. Николаева, Т.Б. Косых, А.В.Николаев, А.К. Звездин, УФН 185, 10 (2015)
 [4] F.A.Maksutova, R.V.Solonetsky, R.M.Vakhitov, A.P.Pyatakov *EPL* 129, 27004 (2020).
 [5]. R. M. Vakhitov, R. V. Solonetsky, V. R. Gurjanova, A. R. Nizhatova, D. A. Sechin, T. T. Gareev, A. P. Pyatakov, *Phys. Rev.*, B 104, 144407 (2021)
 [6]. Р. М. Вахитов, Р. В. Солонецкий, А. Р. Ниязова, ФММ, 124, 1 (2023)

Неустойчивость двумерной капли магнитной жидкости в магнитном поле

Орехова Светлана Михайловна

Закинян Артур Робертович, Закинян Анастасия Александровна

Северо-Кавказский федеральный университет

Закинян Артур Робертович

smorekhova@ncfu.ru

Возможность контролировать динамику капель смешивающихся жидкостей имеет большое значение для таких отраслей промышленности, как химическая промышленность и микрофлюидика. Использование магнитной жидкости в качестве дисперсной фазы позволяет управлять этими процессами с помощью магнитного поля.

Для изучения неустойчивостей, возникающих в данной системе под воздействием магнитного поля, была проведена серия экспериментов с каплями ферромагнитной жидкости в жидкой немагнитной среде. Использовались различные жидкости в качестве внешней среды: керосин, авиационное масло, ПАВ.

Методика исследования заключалась в следующем. Горизонтально расположенную ячейку Хеле-Шоу, с расстоянием между плоскостями 0,2 мм, заполняли жидкостью, служившей дисперсной средой, затем вводили каплю магнитной жидкости и включали источник тока, питающий катушки, магнитное поле которых лежало в плоскости ячейки. Изучалось влияние магнитного поля на характер и форму возникающих неустойчивостей в системе. Также было исследовано влияние массы капли на протекающие процессы.

Выявлено, что формирование формы и структуры капли зависит от величины магнитного поля. Это связано с тем, что неустойчивость развивается в части границы диффузии капель, перпендикулярной магнитному полю. Обнаружено, что конечная длина волны неустойчивости уменьшается с увеличением магнитного поля. В связи с этим возникает разнообразие форм капель в зависимости от величины магнитного поля.

Также природа внешней среды влияет на структуру возникающих неустойчивостей. В керосине граница капли имеет большее количество пиков, чем в масле. В системе, где в качестве внешней среды использовался ПАВ наблюдалось образование гораздо меньшего числа пиков, чем в других системах. Это происходит из-за того, что основой используемой магнитной жидкости являлся керосин, который не имеет межфазного натяжения на границе с керосином, на границе с маслом же действует межфазное натяжение, тогда как на границе с ПАВ оно действует сильнее.

Во всех вариантах данной системы форма диффузионной границы капли меняется со временем: в слабом магнитном поле (~0,5 кА/м) капля очень медленно удлиняется, растягиваясь вдоль поля. В случае внешней среды керосина и масла в полях порядка 5 – 7 кА/м на границе сначала появляется множество очень маленьких пиков, затем они сливаются и образуют два больших пика с выраженными неустойчивостями по краям. В ситуации, когда внешней средой являлся ПАВ, в данных полях капля также растягивалась вдоль поля, без образования неустойчивостей по краям, из-за наличия сильного межфазного натяжения. В полях порядка 10 – 30 кА/м средняя часть капли остается практически неизменной, а увеличение происходит только за счет вершин капли, которые быстро удлиняются, данные процессы приблизительно одинаковы для всех используемых в эксперименте дисперсных сред. В сильном магнитном поле (~90 кА/м) коротковолновые возмущения развиваются достаточно быстро. Поэтому на вершинах капли появляются многочисленные пики, и удлинение капли вдоль магнитного поля становится хаотичным, в системе, где внешней средой являлся ПАВ, происходила фрагментация капли и отрыв образовавшихся пиков в отдельные капли. Масса капли также оказывает влияние на скорость развития пиков, образующих неустойчивость. Обнаружено, что в крупных каплях процессы протекают быстрее, чем в более мелких на соответствующих значениях величины магнитного поля.

На основе проведенных исследований можно сделать вывод о том, что имеет место возможность управления закономерностями проявления неустойчивости капель магнитной жидкости в различных средах при помощи магнитного поля.

Исследование колебаний доменных границ в кристаллах ферритов-гранатов

Рогозникова Наталья Сергеевна

Памятных Лидия Алексеевна, Мехоношин Дмитрий Сергеевич

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина

Мехоношин Дмитрий Сергеевич

nataschaniga@mail.ru

Работа посвящена установлению закономерностей колебаний доменных границ (ДГ) в переменном магнитном поле в монокристаллах ферритов-гранатов с разным характером магнитной анизотропии.

Исследование колебаний ДГ проведено на двух образцах – пластинах-(111) феррита-граната $(\text{TbErGd})_3(\text{FeAl})_5\text{O}_{12}$ с полосовой доменной структурой (ДС) с разным типом магнитной анизотропии (образец №1 – одноосный, образец №2 – многоосный) в интервале температур 300 – 77 К, включающем температуру магнитной компенсации (табл.1). Динамическая ДС наблюдалась с помощью магнитооптического эффекта Фарадея в режиме контраста ДГ с помощью стробоскопической методики и фиксировалась на высокоскоростную камеру. Экспериментальные видеоролики обрабатывались с помощью специальной компьютерной программы. Низкочастотное переменное магнитное поле $H(t) = H_0 \sin 2\pi ft$ прикладывалось перпендикулярно плоскости пластин.

Таблица 1 – Параметры образцов: L – ширина образца; K_1 и K_u – константы кубической и одноосной магнитной анизотропии; T_k – температуру магнитной компенсации

№	Состав	Ориентация	L , мкм	K_1 , эрг/см ³	K_u , эрг/см ³	T_k , К
1	$(\text{TbErGd})_3(\text{FeAl})_5\text{O}_{12}$	(111)	50	$-3,2 \cdot 10^3$	$3,8 \cdot 10^3$	200
2	$(\text{TbErGd})_3(\text{FeAl})_5\text{O}_{12}$	(111)	73	$-3,4 \cdot 10^3$	$5,5 \cdot 10^3$	200

Экспериментальные зависимости амплитуды колебаний ДГ от амплитуды переменного поля $A(H_0)$ сопоставлены с теоретическими, полученными по работе [1]. Введены величины: $D = d_1 + d_2$ – период полосовой ДС, $d_1 = \frac{D}{2} + 2A$, $d_2 = \frac{D}{2} - 2A$ – ширины двух соседних доменов, M_z – проекция намагниченности насыщения на ось z , θ – угол между намагниченностью и плоскостью образца и получена зависимость:

$$\frac{d_1}{d_2} = \frac{4\pi M_z \sin \theta - H_0}{4\pi M_z \sin \theta + H_0} \quad (1)$$

Проанализировав, как изменяются ширина доменов при колебаниях, получили формулу для нахождения амплитуды колебаний ДГ (2).

$$A = \frac{1}{4} (d_1 + d_2) \frac{1 - \frac{d_1}{d_2}}{1 + \frac{d_1}{d_2}} \quad (2)$$

Проведено сопоставление экспериментальных зависимостей $A(H_0)$ при разных температурах с полученными теоретическими по [1]. На рис. 1a, 1b, 1c теоретические зависимости $A(H_0)$ даны в виде сплошных линий.

Для одноосного образца в поле с частотой $f = 400\text{Гц}$ при температуре $T = 300\text{К}$ зависимости $A(H_0)$ являются линейными и хорошо согласуются с теоретическими (рис.1a). В поле с частотой $f = 120\text{Гц}$ при фиксированной температуре, при амплитуде $H_0 > 10\Theta$ ДГ отклонялись от положения равновесия, при увеличении H_0 амплитуда колебаний возрастала практически линейно. Зависимости колебаний ДГ при $T > T_k$ хорошо согласуются с теоретическими (рис.1b) (при этом угол выхода намагниченности из плоскости образца составляет $\theta \approx 19,5^\circ$). При $T < T_k$ экспериментальные и теоретические зависимости $A(H_0)$ согласуются при условии, что угол выхода намагниченности из плоскости образца составляет $\theta \approx 5^\circ$ (рис.1c).

Таким образом в работе на примере пластин ферритов-гранатов с разным типом магнитной анизотропии показано, что экспериментальные зависимости амплитуды колебаний ДГ от амплитуды переменного магнитного поля согласуются с теоретически ожидаемыми.

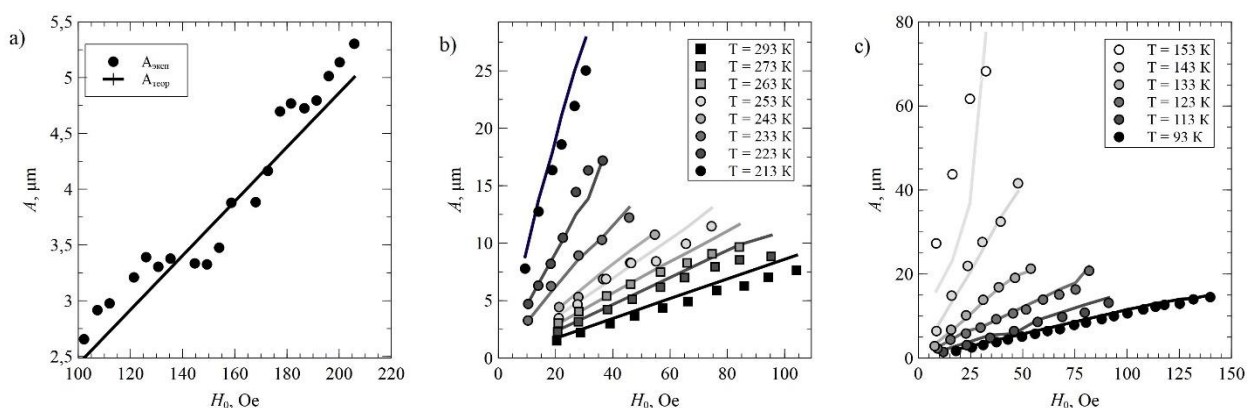


рис.1. Зависимость амплитуды колебаний ДГ от амплитуды переменного поля а) одноосный образец с температурой компенсации $T_k=200\text{К}$ (образец №1); б) многоосный образец с температурой компенсации $T_k=200\text{К}$ при $T > T_k$ (образец №2); в) многоосный образец с температурой компенсации $T_k=200\text{К}$ при $T < T_k$ (образец №2)

Исследование выполнено в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (FEUZ-2023-0020).

Список публикаций:

[1] В.Г. Барьяхтар, Б.А. Иванов В мире магнитных доменов. - Наукова думка, 1986.

Магнитная структура $\text{LiNi}_{0.1}\text{Co}_{0.9}\text{PO}_4$

Ромашко Полина Евгеньевна

Институт естественных наук и математики УрФУ

Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН

Сёмкин Михаил Александрович, к.ф.-м.н.

polina.romashko.2014@mail.ru

Литиевые ортофосфаты LiMPO_4 , где $M = (\text{Ni}, \text{Co})$ относятся к классу магнитоэлектрических материалов. Количество данных о структурных и магнитных свойствах соединений недопированных LiMPO_4 значительно превышает количество публикаций для допированных соединений $\text{LiNi}_{1-x}\text{Co}_x\text{PO}_4$ ($0 \leq x \leq 1$), в которых 3d-ионы одного сорта замещаются 3d-ионами другого сорта. Для того чтобы оценить их магнитоэлектрические свойства нужно одновременно изучить кристаллическую структуру и магнитное состояние в зависимости от замещающих элементов [1]. С этой целью нами были проведены нейтронографические исследования на станции нейтронной порошковой дифракции ДИСК на длине волны нейтронов $\lambda = 2.43805 \text{ \AA}$ (двойной монохроматор на основе меди) с использованием криостата замкнутого цикла в интервале температур от 10 К до 300 К. Основное магнитное состояние соединений $\text{LiNi}_{1-x}\text{Co}_x\text{PO}_4$ характеризуется антиферромагнитным упорядочением ионов 3d-переходного металла при температурах ниже 22 К и ориентацией магнитных моментов вдоль оси c , величиной магнитного момента $2.2 \mu_B$ – для состава $x = 0$, и вдоль оси b и $3.5 \mu_B$ – для $x = 1$ [2].

Кристаллическая структура $\text{LiNi}_{0,1}\text{Co}_{0,9}\text{PO}_4$ описывается пространственной группой $Pnma$ (№ 62). Упорядоченные в орторомбическую симметрию, ионы Li^+ и M^{2+} занимают октаэдрические позиции, ионы P^{5+} – тетраэдрические. Температурные зависимости магнитного момента на ионе 3d переходного металла, хорошо описываются в рамках 2D модели Изинга (формула 1), с параметром порядка $\beta \approx 0.21$, см. рис. 1. Значение температуры Нееля (T_N) используемой в рамках 2D модели Изинга было определено из температурных зависимостей производных магнитной восприимчивости $T_N = 20.7$ К, 21.8 К для $x = 0.9$ и 1, соответственно. При температуре 10 К величина суммарного магнитного момента на ионе 3d переходного металла в $\text{LiNi}_{1-x}\text{Co}_x\text{PO}_4$ для $x = 0.9$ и 1 не превышает 3.5 μ_B . Ионы Ni^{2+} и Co^{2+} в $\text{LiNi}_{1-x}\text{Co}_x\text{PO}_4$ соединениях находятся в высокоспиновом состоянии, что дополнительно подтверждено, сопоставимой величиной длин связей (3d-ион – кислород) из эксперимента $d(\text{Co-O}) = 2.159(5)$ Å с учетом октаэдрических искажений и расчета по Шеннону $\langle \text{Co-O} \rangle = 2.145$ Å.

$$\mu_{2D} = \mu_0 \left(1 - \frac{T}{T_N}\right)^\beta \quad (1)$$

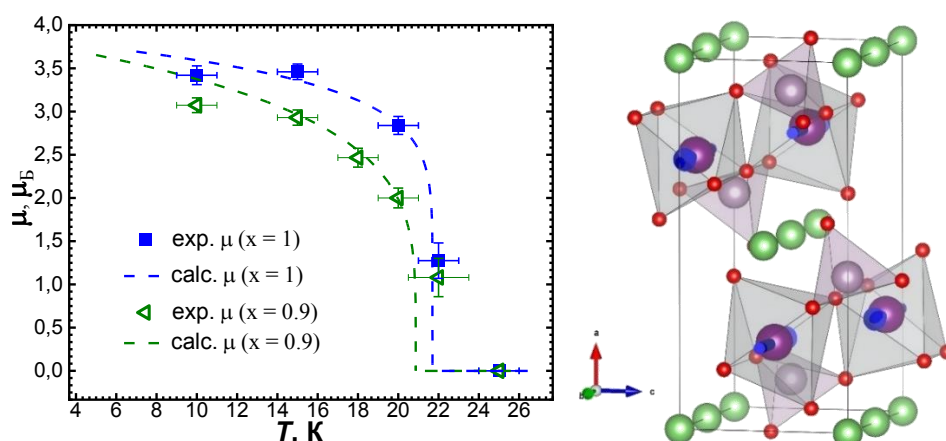


рис.1. (Слева) Температурные зависимости магнитного момента на 3d ионе в $\text{LiNi}_{1-x}\text{Co}_x\text{PO}_4$ для $x = 0.9, 1$, точки – уточненные значения из расчета нейтронограмм, линии – расчетные кривые в рамках 2D модели. (Справа) Модель их магнитной структуры с антиферромагнитным упорядочением 3d ионов вдоль оси b.

Выражаем благодарность за помощь в проведении нейтронографического эксперимента Дюжевой Е.В. (НИЦ «Курчатовский институт», г. Москва). Работа выполнена при финансовой поддержке государственного задания МИНОБНАУКИ России (шифр «Поток» Г.р. № 122021000031-8).

Список публикаций:

- [1] Urusova, N. V., Semkin, M. A., Hoser, A., & Pirogov, A. N. (2022). Features of Ni/Co Ordering in the $\text{LiNi}_{1-x}\text{Co}_x\text{PO}_4$ ($x = 0.3, 0.5, 0.7$) Crystal Structure. *Journal of Surface Investigation*, 16(5), 847-853. <https://doi.org/10.1134/S1027451022050408>
- [2] Semkin, M. A., Urusova, N. V., Hoser, A., Neznakhin, D. S., & Pirogov, A. N. (2022). Models of Ni- and Co-ion occupation in $\text{LiNi}_0.5\text{Co}_0.5\text{PO}_4$ orthophosphate and its magnetic structure. *Journal of Physics Condensed Matter*, 34(16), [165801]. <https://doi.org/10.1088/1361-648X/ac51ff>

Особенности эффекта обменного смещения в пленках типа CrMn/FeNi

Северова Светлана Владимировна

Фещенко Анастасия Александровна, Москалев Михаил Евгеньевич, Горьковенко Александр Николаевич,
Васьковский Владимир Олегович

Уральский федеральный университет имени первого президента России Б.Н. Ельцина

Васьковский Владимир Олегович
severova.sveta.severova@yandex.ru

В современной физике магнитных материалов исследование тонкопленочных сред является актуальным научно-техническим направлением, благодаря широкому спектру возможностей их применения, в том числе в устройствах спинтроники, магнитной сенсорики и высокоплотной записи информации [1]. В частности, значительный интерес представляют слоистые пленочные структуры типа антиферромагнетик/ферромагнетик с эффектом обменного смещения, который заключается в сдвиге петли гистерезиса ферромагнитного слоя вдоль оси магнитных полей. Антиферромагнитной составляющей в таких материалах могут выступать сплавы Иг-Мп и

Pt-Mn, обладающие достаточно высокими функциональными свойствами. В то же время стоит задача поиска альтернативных вариантов, которые содержали бы менее дорогостоящие и редкие компоненты. Одним из возможных её решений является бинарный сплав Cr-Mn [2], в котором наблюдается высокотемпературный антиферромагнетизм. Однако реализация потенциала данного сплава в плёночном состоянии требует специального исследования, которому посвящена данная работа.

Образцы для исследования представляли собой многослойные плёнки Ta(5нм)/Cr_{100-x}Mn_x(L)/Fe₂₀Ni₈₀(10нм)/Ta(5нм) и были получены методом магнетронного распыления на покровных стёклах Corning. В ходе эксперимента варьировались состав слоя Cr_xMn_{100-x} (0 ≤ x ≤ 100), его толщина L (20-100 нм), температура подложки T_s (100-500°C), а также были выполнены измерения гистерезисных свойств выбранных плёнок в интервале T от 5 до 300 К. Аттестация структурного состояния плёнок проведена на рентгеновском дифрактометре Pananalytical. Для измерений магнитных свойств использовались измерительный комплекс PPMS DynaCool, СКВИД-магнитометр MPMS XL7 и Керр-магнитометр EvicoMagnetics.

В результате проведённых экспериментов были получены зависимости поля обменного смещения петель гистерезиса слоя Fe₂₀Ni₈₀ от указанных выше параметров (рис.1 а-г). Их анализ позволил заключить, что на системе Cr-Mn можно реализовать обменное смещение при температурах, превышающих комнатную. Установлены интервалы составов и толщин, при которых имеет место указанное явление. В то же время сделано заключение о низкой магнитной анизотропии антиферромагнитного слоя, ограничивающей величины поля обменного смещения и температуры блокировки. Обсуждаются возможные пути повышения данных функциональных параметров, в том числе за счёт увеличения среднего размера кристаллитов в слое Cr-Mn.

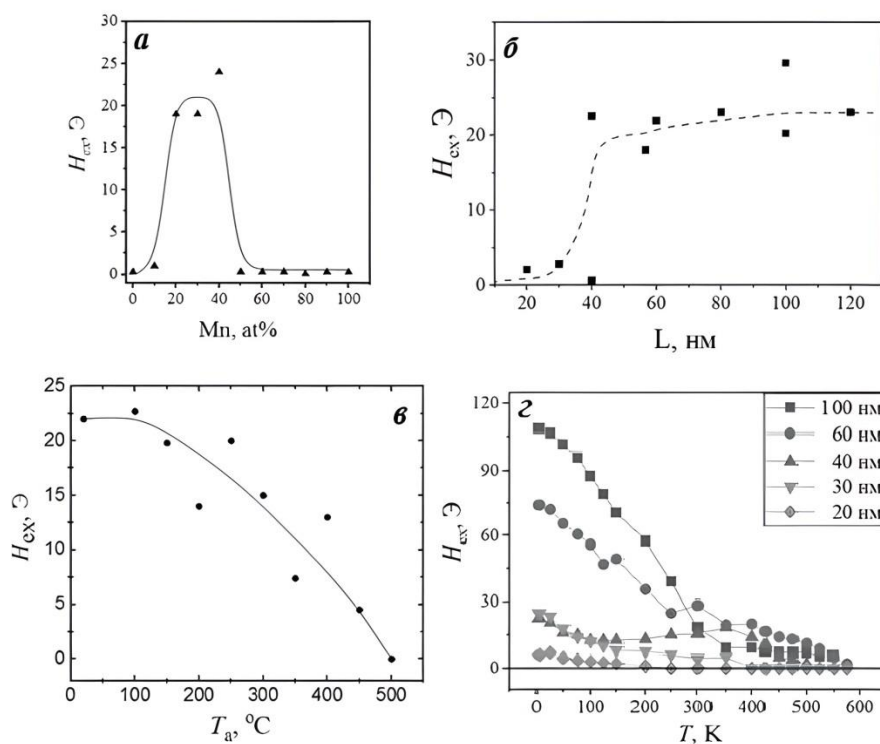


рис.1 Зависимости поля обменного смещения в плёнках типа Cr_{100-x}Mn_x/Fe₂₀Ni₈₀ от: а – концентрации Mn в слое Cr-Mn; б – толщин слоя Cr-Mn; в – температуры подложки; г – температуры измерений

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ, проект №22-22-00814

Список публикаций:

- [1] O'Grady K. et al. Anisotropy in antiferromagnets //Journal of Applied Physics. – 2020 – Vol. 128 – No. 4 – P. 40901
 [2] Feng W. et al. Structural and magnetic phase diagrams of epitaxial Cr-Mn alloy thin films //Journal of Applied Physics. – 2010 – Vol. 108 – No. 7 – P. 73915

Влияние термомагнитной обработки на свойства магнитомягких сплавов Fe-Ge

Тимофеева Анастасия Владимировна

Лукишина Вера Анатольевна, Ершов Николай Владимирович, Горностырев Юрий Николаевич
Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения РАН
timofeeva_av@imp.uran.ru

Для улучшения мягких магнитных свойств сплавов Fe-Si и Fe-Al, которые широко используются в качестве основных материалов для изготовления сердечников дросселей, трансформаторов, для наведения магнитной анизотропии применяется термомагнитная (ТМО) или термомеханическая (ТМехО) обработка [1–3]. Сплавы типа Fe-X (X = Si, Al, Ga, Ge) интересны тем, что помимо наведенной магнитной анизотропии в них наблюдается большая (Fe-Al) [4] и гигантская магнитострикция (Fe-Ga, Fe-Ge) [5,6]. Результаты исследований концентрационной зависимости эффективности ТМО и ТМехО для сплавов с кремнием и алюминием приведены в многочисленных публикациях второй половины XX века. В случае, когда X = Ga, показано, что с увеличением содержания галлия имеет место значительный рост эффективности ТМО, которая достигает своего максимума при 15–18 ат.% Ga, после чего уменьшается [7]. В докладе приводятся результаты аналогичных исследований при X = Ge для ТМО в постоянном и переменном магнитных полях.

Диски Fe-Ge 3–22 ат.% с шагом 2–3 ат.% проходили гомогенизирующий (950°C/30 ч) и рафинирующий (1050°C/4 ч) отжиги, далее из таких дисков вырезались кольца. Состояние образцов после таких обработок было принято за исходное. Дополнительно кольцевые образцы проходили ТМО при 450°C в постоянном или знакопеременном поле 30 Э. Исследование петель магнитного гистерезиса как в исходном состоянии, так и после ТМО проводилось с помощью установки на основе микроверметра Ф190 (рис. 1а). В результате определения значений магнитных характеристик (коэрцитивная сила H_c и остаточная намагниченность B_r) и их относительных изменений ΔH_c и ΔB_r были построены графики зависимостей этих изменений (рис. 1б, в).

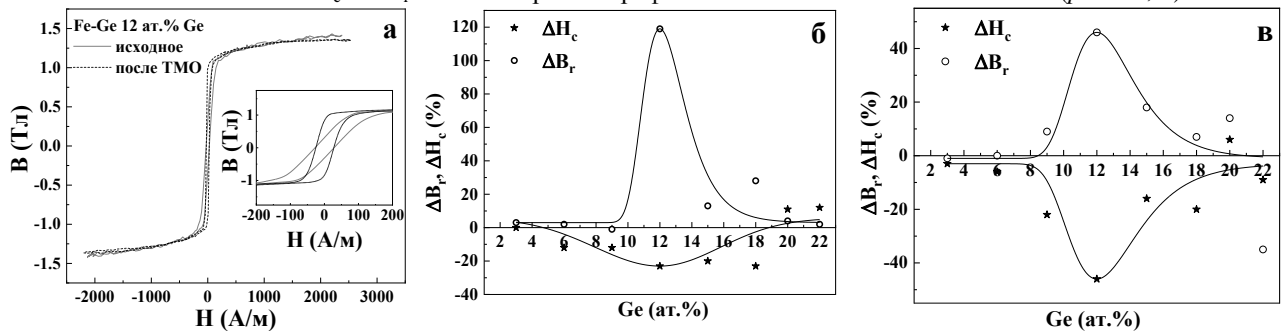


рис.1. Петли гистерезиса до и после ТМО в постоянном поле, на вставке та же петля гистерезиса в диапазоне полей от -200 до 200 А/м (а). Относительные изменения магнитных параметров (ΔH_c и ΔB_r) после ТМО в постоянном (б) и переменном (в) магнитных полях

Как и в случае сплава Fe-Ga [7], концентрационная зависимость эффективности ТМО образцов Fe-Ge в постоянном и знакопеременном полях имела куполообразную зависимость. Такой характер зависимости эффективности ТМО в сплавах Fe-X от содержания элемента X объясняется тем, что в области неупорядоченного твердого раствора или A2-фазы по мере увеличения концентрации появляется и растет доля кластеров B2-фазы, объемное анизотропное распределение которых формируется при отжиге во внешнем поле и после охлаждения обеспечивает анизотропию магнитных свойств [8]. После пересечения границы двухфазной области появляются области D0₃-фазы, которые довольно быстро увеличиваются в размере и объеме, поглощают B2-кластеры и тем самым подавляют эффект ТМО – наведенную магнитную анизотропию [9, 10]. Наблюдаемая эффективность ТМО начинает снижаться. Наибольший эффект ТМО и в постоянном, и в знакопеременном полях наблюдался при 12 ат.% германия.

Список публикаций:

- [1] Sugihara M. // *J. Phys. Soc. Jpn.* // 1969. V. 15. N. 7. P. 1456.
- [2] Старцева И. Е., Шулика В. В., Шур Я. С. // *Изв АН СССР. Сер. физ.* 1975. Т. 39. № 7. С. 1389.
- [3] Старцева И. Е., Шулика В. В., Дмитриева Н. В., Лукишина В. А. // *ФММ.* 1980. Т. 50. № 2. С. 445.
- [4] Restorff J B., Wun-Fogle M., Hathaway K. B., Clark A. E., Lograsso T. A., Petculescu G. // *J. Appl. Phys.* 2012. V. 111. N. 3. P. 023905.
- [5] Clark A. E., Hathaway K. B., Wun-Fogle M., Restorff J. B., Lograsso T. A., Keppens V. M., Petculescu G., Taylor R. A. // *J. Appl. Phys.* 2003. V. 93. P. 8621.
- [6] Wu D., Xing Q., McCallum R. W., Lograsso T. A. // *J. Appl. Phys.* 2008. V. 103. P. 07B307.
- [7] Лукишина В. А., Шишкин Д. А., Кузнецов А. Р., Ершов Н. В., Горностырев Ю. Н. // *ФТТ.* 2020. Т. 62. № 10. С. 1578.
- [8] Соколов Б. К., Черненко Ю. П., Лукишина В. А., Федоров В. И., Ершов Н. В // *ДАН.* 2004. Т. 399. № 2. С. 185.
- [9] Forsch K. // *Phys. Status. Solidi.* 1970. V. 42. N. 1. P. 329.
- [10] Hilfrich K., Kölker W., Petry W., Scharpf O., Nembach E. // *Acta Metallurg. Mater.* 1994. V. 42. N. 3. P. 743.

Влияние размеров слоев на связанную динамику магнитных вихрей в мультислойных проводящих наностолбках

Филиппова Виктория Владимировна

Фасхутдинов Радмир Альфредович

Уфимский университет науки и технологий

Екомасов Евгений Григорьевич

mukhamadeeva.vika@mail.ru

Большой интерес многих исследователей в последние годы прикован к трехслойным наностолбкам, которые имеют два магнитных пермалловых слоя, разделенных немагнитным слоем меди [1]. В магнитных слоях может существовать, как основное состояние, магнитный вихрь. В двухвихревых спин трансферных наноосцилляторах (СТНО), построенных на базе таких наностолбиков, динамика вихрей кардинально меняется по сравнению с одновихревым СТНО [1-4]. Для случая спин-трансферного наноосциллятора со средним диаметром (200 нм), магнитными слоями из пермаллоя толщиной 4 нм и 15 нм и толщиной немагнитного слоя 10 нм было показано [2], что возможны три режима связанного движения вихрей: колебания затухающих вихрей, колебания стационарных вихрей с одинаковой полярностью и колебания стационарных вихрей с разной полярностью. Для случая спин-трансферного наноосциллятора с малым диаметром (120 нм), магнитными слоями из пермаллоя толщиной 4 нм и 15 нм и толщиной немагнитного слоя 10 нм было показано [3,4], что возможны три режима связанного движения вихрей: колебания затухающих вихрей, колебания стационарных вихрей и режим "вылета" вихря из магнитного слоя. С помощью микромагнитного моделирования с использованием пакета SPINPM найдено, что при изменении толщины немагнитного слоя в СТНО обоих радиусов наблюдаются все те же режимы связанной динамики вихрей. Однако, с увеличением толщины промежуточного слоя меди, для СТНО диаметра 120 нм уменьшаются величины критических токов, характеризующих величину тока, при котором один динамический режим сменяется другим (см. ???). С увеличением толщины промежуточного слоя меди, для СТНО диаметра 200 нм наблюдается увеличение критических токов, характеризующий переход от одного типа движения к другому. Так же найдены для случая разных толщин немагнитного слоя зависимости радиуса и частоты стационарных колебаниях вихрей; времени вылета за границы диска и времени выхода вихрей на стационар от величины спин-поляризованного тока. Так был исследован случай двух одинаковых магнитных слоев из пермаллоя по 15 нм толщиной. Было обнаружено, что если изменение немагнитного слоя изменяет только величину критических токов, то изменение толщины магнитного тока может менять как величину критических токов, так и частоту и радиусы стационарных колебаний вихря.

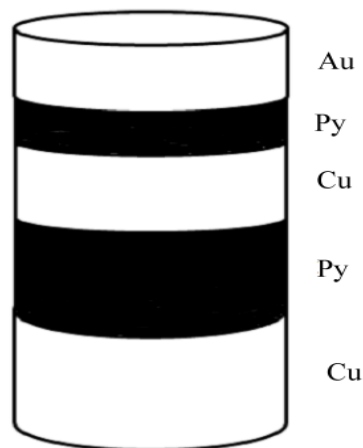


рис.1. Проводящий наностолбик с двумя магнитными слоями пермаллоя (Py), разделенные слоем меди

Финансирование: Ф.В.В. благодарит за финансовую поддержку Государственное задание Российской Федерации на проведение научных исследований лабораториями (№075-03-2021-193/5 30.09.2021).

Список публикаций:

[1] K. A. Zvezdin and E. G. Ekomasov. // PMM, 2022, Vol. 123, No. 3, pp. 201–219

[2] Ekomasov A.E., Stepanov S.V., Zvezdin K.A., Ekomasov E.G. // JMMM. 2019. T.471. №1, С. 513-520.

[3] Екомасов Е.Г., Степанов С.В., Фахретдинов М.И., Антонов Г.И., Екомасов А.Е., Зvezdin К.А. // Челябин. физ.-мат. Журнал. 2020.Т.5. №2, С. 161-173.

[4] Екомасов Е.Г., Степанов С.В., Зvezdin К.А., Пугач Н.Г., Антонов Г.И. // ФММ. 2021.Т122. №3, С. 1-9.

Исследование магнитных свойств сплавов системы Sm-Fe-V, полученных с использованием метода быстрой закалки

Шалагинов Аркадий Николаевич

Голубятникова Александра Александровна, Андреев Сергей Витальевич, Волегов Алексей Сергеевич
Уральский федеральный университет имени первого президента Б.Н.Ельцина

Волегов Алексей Сергеевич, к.ф.-м.н.

arkady.shalaginov@urfu.me

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 транспортных средствах. 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 ThMn₁₂. Эти соединения содержат только 7,7 % РЗЭ, по сравнению с 11,8 % в Nd₂Fe₁₄V. 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}, проведено подводное 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 7,8 кЭ. В докладе будут представлены кривые размагничивания лент Sm-Fe-V, подвергнутых термообработке при различных условиях, их анализ.

7 - Оптика и спектроскопия

Аверкиев Игорь Кронидович, аспирант 3 года обучения
Ижевск, Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, отдел физики и химии поверхности
Комплексное исследование локальной атомной структуры методами EXAFS- и EXELFS-спектроскопии
Бакиева Ольга Ринатовна, к.ф.-м.н.
e-mail: averkiev1997@mail.ru стр. 125

Арсланов Кирилл Павлович, 6 курс
Екатеринбург, Уральский федеральный университет, физико-технологический институт
Оптические спектры расплавов $x\text{Na}_2\text{O}-(100-x)\text{B}_2\text{O}_3$
Хохряков Александр Александрович, д.х.н.
e-mail: arslanov.kirill@mail.ru стр. 125

Бакина Ксения Андреевна, ст. лаборант
Сыктывкар, Федеральный исследовательский центр Коми научный центр Уральского отделения РАН, физико-математический институт
NEEXAFS-исследования биоapatита
e-mail: tylxen@gmail.com стр. 126

Ван Шипэн, 4 курс
Томск, Томский политехнический университет, Инженерная школа ядерных технологий
Исследование спектров молекул типа асимметричного волчка на примере Этилена
Аслаповская Юлия Сергеевна, к.ф.-м.н.
e-mail: 1579295404@qq.com стр. 127

Вэн Линь, 4 курс
Томск, Томский политехнический университет, Инженерная школа ядерных технологий
Аналитические вычисления для многоатомных молекул на основе операторной теории возмущений: асимметричный волчок
Уленеков Олег Николаевич, д.ф.-м.н.
e-mail: 645924723@qq.com стр. 128

Гаппель Екатерина Витальевна, 3 курс
Томск, Томский политехнический университет, Инженерная школа ядерных технологий
Исследование характеристик поглощения сероводорода HMS (M=32,33,34) в районе первой декады: положения линий и коэффициенты самоуширения
Бехтерева Елена Сергеевна, д.ф.-м.н.
e-mail: Katya_gappel@mail.ru стр. 130

Гун Цзядин, 4 курс
Томск, Томский политехнический университет, Инженерная школа ядерных технологий
Эффективный колебательный гамильтониан и волновые функции молекул тетраэдрической симметрии XY_4
Бехтерева Елена Сергеевна, д.ф.-м.н.
e-mail: 2795917045@qq.com стр. 132

Дмитриева Лейла Рамисовна, аспирант 1 года обучения
Новосибирск, Новосибирский государственный технический университет, физико-технический
Спектр излучения диодного лазера при СВЧ модуляции тока инжекции
Дмитриев Александр Капитонович, д.ф.-м.н.
e-mail: dmitrieva-leyla@mail.ru стр. 133

Еремкин Егор Валерьевич, аспирант 1 года обучения
Красноярск, Сибирский федеральный университет, институт инженерной физики и радиоэлектроники
Развитие гибридной модели для расчета плазмонов с переносом заряда в комплексных системах
Федоров Александр Семёнович, д.ф.-м.н.
e-mail: eremkin.e.v@yandex.ru стр. 135

Журин Тимофей Алексеевич, аспирант
Томск, Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, электронной техники
Диффузионное легирование медью пластины Z-среза монокристаллического ниобата лития при температуре 600 °С
Шандаров Станислав Михайлович, д.ф.-м.н.
e-mail: timoxazh1@gmail.com стр. 136

Кузьминов Данила Андреевич, 3 курс
Томск, Томский политехнический университет, Инженерная школа ядерных технологий
Случайные резонансы в многоатомных молекулах: $\text{H}_2\text{C}=\text{CD}_2$, состояния ($\nu_2=1, A1$) / ($\nu_7=2, A1$)
Бехтерева Елена Сергеевна, д.ф.-м.н.
e-mail: dak97@tpu.ru стр. 138

Макаров Павел Андреевич, с.н.с.
Сыктывкар, Федеральный исследовательский центр Коми научный центр Уральского отделения РАН, физико-математический институт
Применение современного открытого программного инструментария в XAFS-спектроскопии: теория, моделирование и анализ экспериментальных данных
e-mail: makarova@ipm.komisc.ru стр. 140

Петрова Ольга Викторовна, н.с.
Сыктывкар, Федеральный исследовательский центр Коми научный центр Уральского отделения РАН, физико-математический институт
Ультратонкая рентгеновская спектроскопия поглощения композитных наноструктурированных материалов и биологических объектов
e-mail: teiou@mail.ru стр. 140

Сидько Сергей Сергеевич, 3 курс
Томск, Томский политехнический университет, Инженерная школа ядерных технологий
Колебательно-вращательная спектроскопия высокого разрешения полосы $\nu_2+\nu_3$ молекулы метилхлорида CH_3Cl : энергетическая структура и абсолютные интенсивности линий
Уленев Олег Николаевич, д.ф.-м.н.
e-mail: sss60@tpu.ru стр. 141

Скандаков Роман Николаевич, аспирант 4 года обучения
Сыктывкар, Федеральный исследовательский центр Коми научный центр Уральского отделения РАН, физико-математический институт
Комплексные исследования *hip*-модифицированного фуллерита C_{60}
Сивков Виктор Николаевич, д.ф.-м.н.
e-mail: scanick@yandex.ru стр. 142

Хаметова Элина Фанилевна, 2 курс
Ижевск, Удмуртский государственный университет, институт математики и физики
Разработка программного комплекса для анализа электронных спектров
Бакиева Ольга Ринатовна, к.ф.-м.н.
e-mail: elinaphanilevna851@gmail.com стр. 143

Хань Тай, 4 курс
Томск, Томский политехнический университет, Инженерная школа ядерных технологий
Исследование спектров молекул типа сферического волчка на примере $^{13}\text{CD}_4$
Громова Ольга Васильевна, д.ф.-м.н.
e-mail: 2719616721@qq.com стр. 145

Комплексное исследование локальной атомной структуры методами EXAFS- и EXELFS-спектроскопии

¹*Аверкиев Игорь Кронидович*

²*Кривинцов Владимир Владимирович*

¹*Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН*

²*Институт катализа им. Г. К. Борескова СО РАН*

¹*Бакиева Ольга Ринатовна*

averkiev1997@mail.ru

Переход от «классических» материалов к наноразмерным материалам, приводит к появлению изменений в различных масштабах, начиная от модификации структуры и заканчивая изменениями на атомном уровне. Ведущую роль в формировании функциональных свойств наноматериалов играет ближайшее атомное окружение. Методы с использованием синхротронного излучения являются мощными инструментами изучения локального окружения вокруг атома определенного типа, среди которых спектроскопия протяженной тонкой структуры рентгеновского поглощения (EXAFS - Extended X-ray Absorption Fine Structure) играет ключевую роль. Данный метод основан на возбуждении внутреннего уровня атома вещества и регистрации результата когерентного рассеяния фотоэлектрона на ближайшем окружении. Анализ EXAFS спектров позволяет определять параметры локальной атомной структуры – парциальные координационные числа, длины химической связи и параметры ее дисперсии. Эта информация может иметь решающую роль при синтезе функциональных материалов наноразмерного масштаба.

При этом исследование локального окружения легких элементов с использованием рентгеновского излучения может быть затруднительно, поскольку в этом случае необходимо использовать линию мягкого и/или ультрамягкого рентгена. В качестве альтернативы рентгеновского излучения может быть использовано возбуждение моноэнергетичным потоком электронов. В этом случае регистрируется результат когерентного рассеяния вторичного электрона на локальном окружении возбуждаемого атома, в результате спектры по своей природе аналогичны EXAFS. Данный вид спектроскопии основан на анализе протяженной тонкой структурой потерь энергии электронов (EXELFS - Extended Electron Energy Loss Fine Structure). Изменение энергии и/или угловой геометрии падающего электронного потока позволяет проводить анализ локальной атомной структуры с вариацией глубины анализа.

В настоящей работе проведено исследование локальной атомной структуры системы металл/легкий элемент (на примере соединений Ti, TiH₂, Ti₂AlC) используя экспериментальные данные как EXAFS, так и EXELFS спектроскопии. Особенность данного подхода заключается в том, что спектр К-края титана получен с помощью синхротронного излучения (экспериментальные EXAFS спектры), а с помощью электронного возбуждения получены EXELFS спектры M_{2,3} края титана и К-края углерода и кислорода. Комплексный анализ EXAFS и EXELFS спектров позволил получить информацию о параметрах локального окружения атома титана, кислорода и углерода – парциальные длины химической связи, координационные числа и параметры тепловой дисперсии атомов.

Работа выполнена в рамках государственного задания Российской Федерации (НИР № 121030100002-0). Исследования EXELFS проводились в центре коллективного пользования «Поверхность и новые материалы» УдмФИЦ УрО РАН. EXAFS-исследования проводились в центре коллективного пользования «СЦСТИ» на базе новосибирского комплекса ВЭПП-4-ВЭПП-2000, ИЯФ СО РАН.

Оптические спектры расплавов $x\text{Na}_2\text{O}-(100-x)\text{B}_2\text{O}_3$

Арсланов Кирилл Павлович

Институт металлургии УрО РАН

Хохряков Александр Александрович, д.х.н.

arslanov.kirill@mail.ru

Боратные расплавы представляют -электронные системы, чьи свойства контролируются распределением π -электронов в борокислородной сетке расплава. В [1] развита электронная теория щелочноборатных систем. Было установлено, что самая высокая занятая молекулярная орбиталь представляет несвязывающие уровни (π -характер) для мостиковых кислородов. Эта орбиталь в основном состоит из р атомных орбиталей кислорода. Это позволяет рассмотреть 2 типа электронных переходов, которые реализуются в различных типах надструктурных единиц расплава. Это электронный переход с 2р орбитали мостиковых кислородов $\text{B}^4\text{-O-B}^4$ и $\text{B}^4\text{-O-B}^3$ на акцепторную 3s орбиталь атома натрия. Найденные полосы переноса заряда асимметричны и их

интенсивность меняется сложным образом с составом расплава. Результаты разложения этих полос на гауссианы приведены на рисунке.

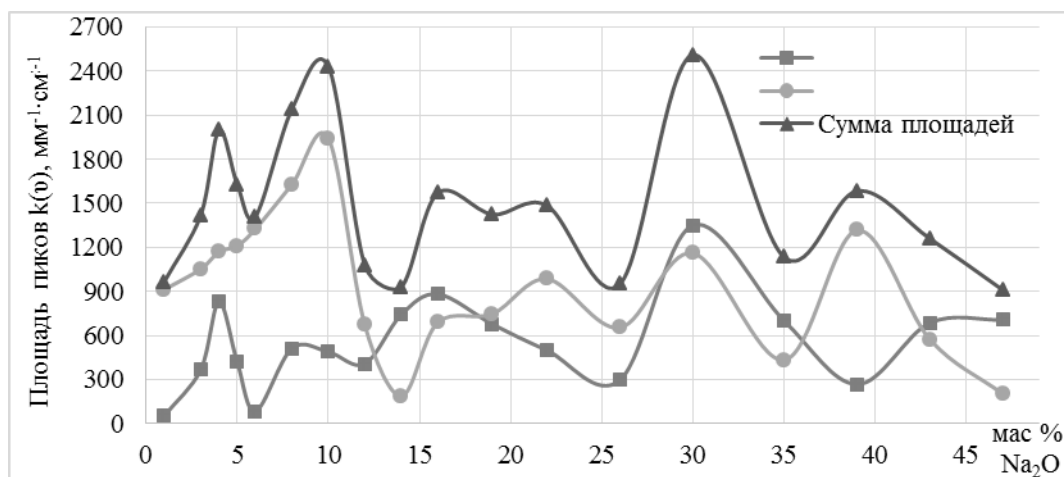


рис.1. Зависимость площади пиков спектра поглощения от состава

Отметим, что полосы переноса заряда характеризуют изменения концентрации B^4 в натриевоборатном расплаве. B^4 входит различные типы надструктурных единиц расплавов (см. таблицу). Низкочастотные полосы разложения характеризуют полиборатные группировки двумя совмещенным полиэдрами бора (B^4 - O - B^4). Изменение их концентраций показаны на рисунке и в таблице:

Концентрация Na ₂ O	Группировки с B^4 - O - B^4	Группировки с B^4 - O - B^3
0-10 мас%	Цепочки BO_4	Триборатные группы $B_3O_3O_4^-$
15-25 мас%	Ди-триборатные группы $B_3O_3O_5^{2-}$	Пентоборатные группы $B_5O_6O_4^-$
25-35 мас%	Ди-триборатные группы $B_3O_3O_5^{2-}$	Тетраборатные группы $B_8O_{10}O_6$
>30 мас%	Диборатные группы $B_4O_5O_4^{2-}$	Тетраборатные группы $B_8O_{10}O_6$

Список публикаций:

[1] H. Kawazoe, H. Hosono, and T. Kanazawa // *J.Non-Cryst.Sol.* 1978. V. 29. № 2. P. 159-171.

NEXAFS-исследования биоапатита

Бакина Ксения Андреевна

Петрова Ольга Викторовна, Сивков Виктор Николаевич

Коми научный центр Уральского отделения Российской академии наук

Петрова Ольга Викторовна

tylxen@gmail.com

Изучение химического состава и структуры композитных биологических материалов, состоящих из органических и неорганических элементов, представляет большой интерес как с прикладной точки зрения, так и с точки зрения фундаментальных исследований, а также исследований исторического развития живых организмов. К подобным материалам, в частности, относятся рассматриваемые в настоящей работе кости и прочие минерализованные элементы скелета ледяных рыб и млекопитающих, представляющие собой композитный, сложноорганизованный материал, включающий органические и неорганические компоненты — коллаген и биоапатит соответственно — а также липиды и воду.

Биоапатит, являющийся частью костных тканей живых организмов, слабо кристаллизован, состоит из кристаллитов размером порядка $50 \times 25 \times 5$ нм; содержание гидроксильной группы [ОН] в биоапатите невелико [1]. В костях млекопитающих и большинства рыб биоапатит содержится в форме гидроксиапатита $Ca_{10}(PO_4)_6(OH)_2$ (hydroxapatite, HAP) и его замещённых форм, в частности, в форме карбонатзамещённого гидроксиапатита В-типа. В этом случае происходит замещение фосфатного аниона $[PO_4]^{3-}$ ионами $[CO_3]^{2-}$.

Кость имеет нанокристаллическое строение и её можно представить в виде трёхмерной сверхрешётки. Составляющие эту сверхрешётку конгломераты образуют основу минерального матрикса кости и представляются в виде системы нанокристаллитов HAP, которые разделяются слоями ненасыщенного раствора

ионов кальция и фосфата. Как показали исследования, электронная структура НАР, входящего в состав костной ткани, зависит от линейных размеров его нанокристаллитов. Уменьшение размеров нанокристаллитов L и учёт гидратированной прослойки толщиной d между ними приводит к сдвигу плотности свободных $3d$ -состояний в сторону меньших энергий (красный сдвиг) при переходе от монокристаллического НАР к нанокристаллическому. Аналогичный сдвиг наблюдается в спектрах NEXAFS (near edge X-ray absorption fine structure, ближняя тонкая структура рентгеновских спектров поглощения) в области края поглощения $Ca\ 2p$, демонстрирующих электронный переход с занятого $2p$ - на свободные $3d$ -состояния. Согласно теоретическим расчётам [2], величина красного сдвига δE_{3d} в области NEXAFS $Ca\ 2p$ -спектров нанокристаллического НАР по сравнению с монокристаллическим пропорциональна отношению толщины гидратированных слоёв к среднему размеру кристаллитов: $\delta E_{3d} = E_{3d} \cdot d / L$, где $E_{3d} \approx 2\ \text{эВ}$ — энергия свободного $3d$ -состояния, величина которой отсчитывается от дна зоны проводимости.

В данной работе на примере черепа и челюсти ледяной рыбы, а также плавника и позвонка кита путём анализа $Ca\ 2p$ и $C\ 1s$ NEXAFS-спектров проведена оценка процентного содержания групп $[CO_3]^{2-}$ в составе биоапатита кости, а также величины красного сдвига $3d$ -состояний при переходе от твердотельного к нанокристаллическому НАР.

Исследования минерализованных образований ледяной рыбы и кита и кальцийсодержащих материалов (оксида кальция CaO , кальцита $CaCO_3$, фосфата кальция $Ca_3(PO_4)_2$, НАР $Ca_{10}(PO_4)_6(OH)_2$, флорапатита $Ca_5(PO_4)_3F$) проводились с помощью NEXAFS-спектроскопии на Русско-немецком канале выхода и монохроматизации синхротронного излучения синхротрона BESSY-II путём регистрации полного электронного выхода из образца (total electron yield, TEY).

Список публикаций:

[1] Szpak P. // *J. Archaeol. Sci.* 2011. V. 38. № 12. P.3358-3372.

[2] Pavlychev A. A., Avrunin A. S., Vinogradov A. S. et al. // *Nanotechnology.* 2016. V. 27. P.504002.

Исследование спектров молекул типа асимметричного волчка на примере C_2H_4

Ван Шипэн

Национальный исследовательский Томский политехнический университет

Аслаповская Юлия Сергеевна, к.ф.-м.н.

1579295404@qq.com

Этилен (C_2H_4) — это природное соединение, содержащееся в окружающем воздухе и влияющие на химический состав атмосферы и глобальный климат. Этилен относится к гормонам биотического стресса, участвует в ускорении роста и созревания плодов. В итоге его роль в биохимии растений, а также физиологии, метаболизме млекопитающих и экологии является предметом обширных исследований. Благодаря своей высокой реакционной способности по отношению к гидроксильным (ОН) радикалам этилен играет значительную роль в химии тропосферы, а следовательно, и формировании глобального климата. Этилен был обнаружен в атмосферах планет не только солнечной системы, но и за ее пределами, в частности, в атмосферах планет гигантов, таких как Титан и др. Этилен является одним из базовых соединений на производстве, в химической и нефтехимической промышленности, представляя интерес для физико-химических исследований.

В данной работе было проведено исследование полосы $\nu_2 + \nu_{10}$, которая лежит в диапазоне $2300-2700\ \text{см}^{-1}$ с центром в $2435.63\ \text{см}^{-1}$. Изучаемый спектр был зарегистрирован на Фурье спектрометре BRUKER 125HR в университете Оулу Финляндия. Давление в ячейке составило $0.83\ \text{Тор}$. Используемая ячейка - многоходовая с величиной оптического пути равного $0.8\ \text{м}$. Источник излучения - Глобар. Вся регистрация спектра заняла 29 часов и включала 1720 сканирований. На рисунке 1 Представлен экспериментально зарегистрированный спектр молекулы C_2H_4 .

Для исследования молекулы этилена, принадлежащей к типу асимметричных волчков, был использован оператор Уотсона [1]. Идентификации спектра проводилась с использованием метода комбинационных разностей, параметры основного состояния, взятые из работы [2].

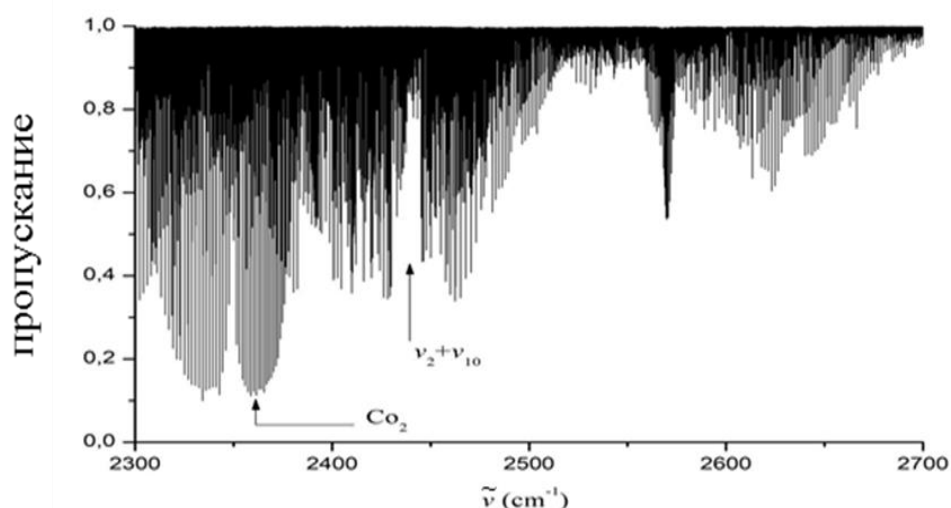


рис. 1 Спектр высокого разрешения молекулы C_2H_4 .

В ходе исследования было определено около 1000 переходов с максимальными значениями квантовых чисел J/K_a равное $30/6$ для полосы $\nu_2+\nu_{10}$, соответственно. На этой основе была решена обратная спектроскопическая задача и определены параметры эффективного гамильтониана, которые позволяют воспроизводить исходные экспериментальные данные с точностью, близкой к экстремальной погрешности.

Список публикаций:

- [1] Watson J.K.G. // *Determination of centrifugal coefficients of asymmetric – top molecules*. *J. Chem. Phys.* 1967. V. 46. P. 1935-1949.
 [2] Ulenikov O.N. // *High-resolution spectroscopy study of C_2H_4 : re-analysis of the ground state and ν_4 , ν_7 , ν_{10} u ν_{12} , vibration bands*. *J. Quantitative Spec. & Rad. Transfer.* 2013. V. 118. P. 14-25.

Аналитические вычисления для многоатомных молекул на основе операторной теории возмущений: асимметричный волчок

Вэн Линь

Томский политехнический университет

Уленков Олег Николаевич, д.ф.-м.н.

645924723@qq.com

Современная теоретическая колебательно-вращательная спектроскопия молекул является важным источником информации о квантово-механических свойствах объектов микромира. Целью работы является разработка на основе операторной теории возмущений соотношений, позволяющих связать спектроскопические параметры молекулы типа асимметричного волчка с соответствующими параметрами внутримолекулярной потенциальной функции.

Мы можем быстро получить гамильтониан молекулы в декартовой системе координат с помощью приближения Борна-Оппенгеймера, в то время как для лучшего описания состояния молекулы нам необходимо перевести гамильтониан в декартовой системе координат во внутренние координаты молекулы. Можно показать после ряда преобразований, что в результате гамильтониан молекулы принимает вид [1]

$$H = \frac{1}{2} \sum_i P_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \mu_{\alpha\beta}(Q)(J_\alpha - G_\alpha)(J_\beta - G_\beta) + V(Q) - \frac{\hbar^2}{8} \sum_\alpha \mu_{\alpha\alpha}(Q). \quad (1)$$

где первое слагаемое в (1) описывает кинетическую энергию гармонического движения, второе слагаемое в (1) является энергией вращательного движения и третье слагаемое в (1) описывает внутримолекулярный потенциал.

Решить уравнение Шредингера с гамильтонианом молекулы в виде (1) оказывается невозможно. Поэтому, чтобы решить уравнение Шредингера, молекулярной спектроскопии вводится так называемый «эффективный» оператор с помощью унитарного преобразования [2] оператора (1)

$$H_{eff} = U^\dagger H U, \quad (2)$$

Для определения оператора (2) и соответствующего унитарного оператора U мы используем операторную теорию возмущений. Предположим, что оператор Гамильтона квантовой системы можно разбить на два слагаемых

$$H = H_0 + h = H_0 + \lambda H_1 + \lambda^2 H_2 + \dots, \quad (3)$$

где λ – малый параметр и H_0 есть оператор нулевого приближения, для которого задача на собственные значения решена:

$$H_0 |n\rangle = E_n^0 |n\rangle, \quad (4)$$

Тогда, используя преобразование (2) в виде

$$H_{eff} = \exp(-i \sum_{n=1}^{\infty} g_n) (H_0 + h) \exp(+i \sum_{n=1}^{\infty} g_n), \quad (5)$$

можно показать, что эффективный оператор (5) можно представить в виде рекуррентной формулы

$$H_{xy} = \langle x | \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left[-i \sum_{n=1}^{\infty} g_n, H_0 + h \right]^{(k)} | y \rangle, \quad (6)$$

Входящее в формулы (5)-(6) операторы имеют вид

$$h = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \mu_{\alpha\beta}(Q) (J_\alpha - G_\alpha) (J_\beta - G_\beta) + V_{потенциал}, \quad (7)$$

операторы J – это компоненты оператора полного углового момента, заданные относительно осей молекулярной координатной системы; операторы G_α — это компоненты колебательного момента, которые определяются соотношениям

$$G_\alpha = \sum_{ij} \xi_{ij}^\alpha Q_i P_j = \sum_{\beta\gamma} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \sum_N l_{N\beta i} l_{N\gamma j} Q_i P_j, \quad (8)$$

величины $\mu_{\alpha\beta}(Q)$ являются элементами матрицы обратных моментов инерции, зависящими от колебательных координат Q_i

$$\mu_{\alpha\beta}(Q) = I_{\alpha\beta}^{-1}, \quad (9)$$

$$I_{\alpha\beta}^{-1} = \sum_{\gamma\delta} I_{\alpha\beta}^{\gamma\delta} I_{\gamma\delta}^0, \quad (10)$$

$$I_{\delta\beta}^{\gamma\delta} = I_{\alpha\beta}^0 + \frac{1}{2} \sum_i a_i^{\alpha\beta} Q_i, \quad (11)$$

$$I_{\alpha\beta}^0 = \frac{1}{2} \delta_{\alpha\beta} \sum_{\gamma\delta} m_N (\varepsilon_{\alpha\delta\gamma} (r_{N\gamma}^{0\ 2} + r_{N\delta}^{0\ 2})), \quad (12)$$

$$a_i^{\alpha\beta} = 2 \sum_{\gamma\delta\kappa} \varepsilon_{\alpha\gamma\kappa} \varepsilon_{\beta\delta\kappa} \sum_N m_N^2 r_{N\gamma}^0 l_{N\delta i}, \quad (13)$$

Тензор обратных моментов инерции $\mu_{\alpha\beta}(Q)$ определяется соотношениями (9)-(13), он учитывает жесткость молекулы, ее искажение центробежными силами [3]. Величины $\mu_{\alpha\beta}(Q)$ можно разложить в ряд Тейлора около равновесного положения:

$$\mu_{\alpha\beta}(Q) = \mu_{\alpha\beta}^e + \sum_{\alpha\beta\gamma} \mu_{\alpha\beta}^{\lambda} q_\lambda + \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \mu_{\alpha\beta}^{\lambda\delta} q_\lambda q_\delta + \dots, \quad (14)$$

В случае, если все три момента не равны $\mu_{xx}^{(e)} \neq \mu_{yy}^{(e)} \neq \mu_{zz}^{(e)}$, то молекула является асимметрическим волчком, и уровни энергии могут быть получены численно.

Список публикаций:

[1] Быков А.Д., Макушкин Ю.С., Улеников О.Н. // Новосибирск: Изд-во Наука, Сибирское отделение, 1989.

[2] Jerrgensen F. and Pedersen T. // Mol. Phys. 1974a. V.21. p.33-47.

[3] Cheglovkov A.E., Ulenikov O.N., Zhilyakov A.S., Cherepanov V.N., Makushkin Y.S., Malikova, A.B. // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. 1998. V. 22(7). P. 997.

Исследование характеристик поглощения сероводорода H₂S (M=32,33,34) в районе первой декады: положения линий и коэффициенты самоуширения

Гаппель Екатерина Витальевна

Ерсин Толганай

Томский политехнический университет

Бехтерева Елена Сергеевна, д.ф.-м.н.

Katya_gappel@mail.ru

Молекула H₂S представляет огромный интерес для спектроскопических исследований, поскольку сероводород является атмосферным газом Земли, а также был обнаружен в атмосферах других планет Солнечной системы и в межзвездном пространстве. Сера является ключевым элементом в химии некоторых планет-гигантов, поскольку предполагается, что газообразные соединения серы вступают в реакцию с NH₃ и конденсируются в виде кристаллов NH₄SH, которые образуют тропосферные облака этих планет [1-3]. Например, сероводород обнаружен в атмосферах Урана и Юпитера. Кроме того, молекула сероводорода, возможно, является индикатором биологической жизни [4-5].

Спектроскопические исследования молекулы H₂S, как и молекулы воды, проводятся активно уже много десятков лет. К настоящему времени, в литературе имеется много информации о поглощении H₂S молекулы в микроволновом, инфракрасном и видимом диапазонах. Однако, имеется существенный недостаток в информации о спектральных интенсивностях поглощения, а также коэффициентах самоуширения для H₂S и ее изотопологах в высоковозбужденных состояниях.

В данной работе выполнен анализ спектра высокого разрешения H₂S в диапазоне полиады V = 3, называемой первой декадой.

Экспериментальные спектры поглощения молекулы были зарегистрированы в Техническом университете Брауншвайга в широком диапазоне 3400-10400 см⁻¹ с использованием Фурье-спектрометра Bruker 125HR (прототип ZP2001 IFS120 HR) при комнатной температуре. Для наиболее полного анализа были выбраны экспериментальные параметры LXP: (1) 182м X 5мбар; (2) 163м X 20мбар.

Молекула H₂S является молекулой типа ассиметричный волчок группа молекулярной симметрии, которой изоморфна группе C_{2v}. Три колебательные координаты q₁, q₂ и q₃ и имеют симметрии A₁, A₁ и B₂ соответственно и имеют собственные частоты 2614.44, 1182.53 и 2628.37 см⁻¹ [6]. Соотношение частот $\omega_1 = \omega_3 = 2\omega_2$ определяет структуру колебательного спектра, характеризуемую полиадным числом $V = v_1 + v_2 / 2 + v_3$. В данной работе исследовалась полиада V=3, включающая десять состояний.

Два типа колебательно-вращательных полос возможно наблюдать в поглощении:

- параллельные - полосы с четным v_3 , правила отбора

$$\Delta J = 0, \pm 1; \Delta K_a = \pm(2n + 1); \Delta K_c = \pm(2m + 1)$$

- перпендикулярные - полосы с нечетным v_3

$$\Delta J = 0, \pm 1; \Delta K_a = \pm 2n; \Delta K_c = \pm(2m + 1)$$

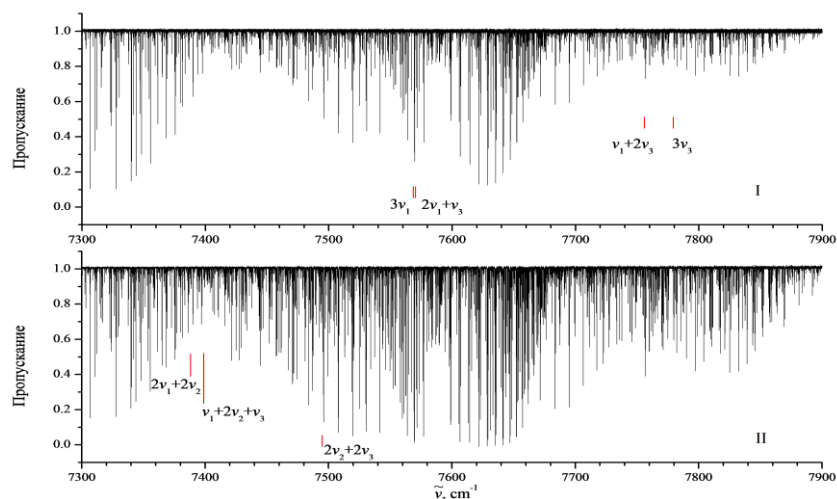


рис.1 Спектр молекулы H_2S

Как показано на рис.1, самая сильная пара полос $3\nu_1$ и $2\nu_1 + \nu_3$ полностью перекрываются и расположены примерно на 176 и 203 cm^{-1} ниже, чем ближайшая более слабая пара полос $3\nu_3$ и $\nu_1 + 2\nu_3$. В свою очередь, три деформационные дважды возбужденные полосы рассматриваемой полиады $(\nu_1 + \nu_2 / 2 + \nu_3) = 3$, а именно, $2\nu_1 + 2\nu_2$, $\nu_1 + 2\nu_2 + \nu_3$, $2\nu_2 + 2\nu_3$ расположены примерно на 156 и 60 cm^{-1} ниже, чем самые сильные полосы $3\nu_1$ и $2\nu_1 + \nu_3$. По этой причине и принимая во внимание значения вращательных параметров А, В и С, можно ожидать, что локальные возмущения колебательно-вращательных структур состояний $(30^+; 0)$ и $(30^-; 0)$ другими колебательными состояниями появятся для $J \geq 5 - 6$. Конечно, сильные резонансные возмущения внутри пар 'локально-модных' состояний $(30^+; 0)$ и $(30^-; 0)$, $(20^+; 0)$ и $(20^-; 0)$, наблюдаются, начиная уже с $J \geq 1$.

Для анализа переходов был использован метод комбинационных разностей, для чего использовалось основное состояние [7]. В результате этого были найдены энергии переходов колебательно-вращательных состояний $(3\ 0\ 0)$, $(2\ 0\ 1)$, $(1\ 0\ 2)$, $(0\ 0\ 3)$, и $(1\ 2\ 1)$ с максимальными значениями квантовых чисел $J=20$ и $K=5$.

Всего проинтерпретировано и отнесено к исследуемым полосам 3787 перехода. Решена обратная спектроскопическая задача. Определены параметры эффективного гамильтониана, восстанавливающие экспериментальные значения 944 колебательно-вращательных уровней со среднеквадратичным отклонением $drms=3.45 \cdot 10^{-4} cm^{-1}$.

Список публикаций:

- [1] Castets A., Ceccarelli C., Lefloch B., Caux E. and Pagani L. // *Sulphur-bearing species in the star forming region L1689N*. *Astron Astrophys.* 2004. V. 413. p.609–622.
- [2] Visscher C, Lodders K, Fegley J.B. // *Atmospheric Chemistry in Giant Planets, Brown Dwarfs, and Low-Mass Dwarf Stars II. Sulfur and Phosphorus*. *Astron. Astrophys.* 2006. V. 648. p. 1181–95.
- [3] Zahnle K, Marley M.S., Freedman R.S., Lodders K., Fortney J.J. // *Atmospheric sulfur photochemistry on hot Jupiters*. *Astrophys. J.* 2009. V. 701. L. 20–4.
- [4] Aladro R., Martin S., Martin-Pintado J., Mauersberger R., Henkel C. // *A $\lambda=1.3$ mm and 2 mm molecular line survey towards M82*. *Astron. Astrophys.* 2011. V. 535. A84.
- [5] Justtanont K., Khouri T., Maercker M., Alcolea J., Decin L., Olofsson H. // *The Herschel Exploitation of Local Galaxy Andromeda (HELGA): IV. Dust scaling relations at sub-kpc resolution*. *Astron. Astrophys.* 2012. V. 537. A144.
- [6] Ulenikov O.N., Bekhtereva E.S., Leroy C. and Gromova O.V. // *On the determination of the intramolecular potential functions for a polyatomic molecule: H2S*. *Russian Physics Journal*. 2008. V. 51. No. 1. p. 18-25.
- [7] Flaud J.-M., Camy-Peyret C., Johns J.W.C. // *The far-infrared spectrum of hydrogen sulfide. The (000) rotational constants*. *Can. J. Phys.* 1983. V. 61. p. 1462–1473.

Эффективный колебательный гамильтониан и волновые функции молекул тетраэдрической симметрии XU_4

Гун Цзядин

Глушков Петр Алексеевич

Томский политехнический университет

Бехтерева Елена Сергеевна, д.ф.-м.н.

2795917045@qq.com

Развитие инфракрасной спектроскопии в последние годы позволило полностью разрешить сложную вращательную структуру многих колебательных полос молекул метана, силана, германа [1-3]. Для объяснения экспериментально наблюдаемых спектров оказывается необходимым использовать теорию колебательно-вращательных взаимодействий в сферических молекулах в свете современной теории неприводимых тензорных систем и операторов углового момента.

Как известно, процесс анализа колебательно-вращательных спектров тетраэдрических молекул XU_4 , в большинстве случаев очень сложен, так как:

(1) Использование метода комбинационных разностей невозможно. Поэтому предсказание центров колебательных полос является важной задачей;

(2) Продвигаясь в область больших значений энергий, - оказывается важным знание колебательных уровней других симметрий, т. к. возрастающая плотность состояний приводит к более сложной картине резонансов, которую необходимо моделировать.

В случае определения колебательного энергетического спектра возможно использование различных моделей. Например, модель осцилляторов Морзе или модель эффективного колебательного гамильтониана. Последняя предполагает использование в качестве нулевого приближения модель гармонического осциллятора. В случае тетраэдрических молекул это одномерный, дважды- и трижды- вырожденные осцилляторы. Использование теории возмущений, в проекционной формулировке, позволяет построить эффективный колебательный гамильтониан для подмножеств резонирующих состояний, называемых полиадами. Следует отметить, что для характеристики полиад используется, так называемое, полиадное число $V = v_1 + \frac{1}{2}v_2 + v_3 + \frac{1}{2}v_4$, которое составлено исходя из соотношения $\omega_1 = \omega_3 = 2\omega_2 = 2\omega_4$ между фундаментальными частотами четырех осцилляторов: $\omega_1 = 3036.2 \text{ cm}^{-1}$; $\omega_2 = 1570.4 \text{ cm}^{-1}$; $\omega_3 = 3157.1 \text{ cm}^{-1}$; $\omega_4 = 1345.3 \text{ cm}^{-1}$ [4].

В этой связи расчет тетраэдрических расщеплений для подуровней в полиадах, а также резонансных взаимодействий для колебательных состояний необходим при построении эффективного оператора.

Целью данной работы является расчет тетраэдрических расщеплений и Ферми-резонансных взаимодействий для колебательных состояний симметрий A_1 , A_2 , E , F_1 и максимального значения полиадного числа $V=4$. Колебательные центры полос симметрии F_2 были рассчитаны ранее в работе [5].

Реализация поставленной цели включает решение нескольких задач:

1. Определить симметризованные колебательные волновые функции для молекулы типа сферического волчка симметрии T_d ;

2. Установить вид симметризованных операторов тетраэдрических расщеплений и резонансов Ферми;

3. Рассчитать элементы матрицы от оператора Гамильтона / вклады в колебательные энергии.

На основе использования следствий колебательно-вращательной теории [6], теории групп и тензорного анализа были получены аналитические выражения для колебательных волновых функций, операторов и матричных элементов тетраэдрических расщеплений. Для этого соответствующая программа была написана в аналитической среде MAPLE.

Для иллюстрации приведены симметризованные волновые функции и матрица гамильтониана, содержащая тетраэдрические расщепления для подуровней состояния $v_1+v_3+2v_4 (F_1)$.

$$\begin{aligned} |1 \rangle &= \frac{-1}{\sqrt{2}} |v_1 = 1 \rangle |v_2 = 0, l_2 = 0 \rangle |v_3 = 1, l_3 = 1, m_3 = 0 \rangle |v_4 = 2, l_4 = 2, m_4 = -2 \rangle \\ &\quad - \frac{1}{\sqrt{2}} |v_1 = 1 \rangle |v_2 = 0, l_2 = 0 \rangle |v_3 = 1, l_3 = 1, m_3 = 0 \rangle |v_4 = 2, l_4 = 2, m_4 = 2 \rangle; \\ |2 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} |v_1 = 1 \rangle |v_2 = 0, l_2 = 0 \rangle |v_3 = 1, l_3 = 1, m_3 = -1 \rangle |v_4 = 2, l_4 = 2, m_4 = -1 \rangle \end{aligned} \quad (1)$$

$$+\frac{1}{\sqrt{2}}|v_1 = 1 \rangle |v_2 = 0, l_2 = 0 \rangle |v_3 = 1, l_3 = 1, m_3 = 1 \rangle |v_4 = 2, l_4 = 2, m_4 = 1 \rangle, \quad (2)$$

где $|1 \rangle$ и $|2 \rangle$ -симметризованные волновые функции.

Матричные элементы гамильтониана тетраэдрических расщеплений показаны в таблице:

	$ 1 \rangle$	$ 2 \rangle$
$\langle 1 $	$2G_{33} + 6G_{44} + 12T_{44} - \frac{8}{3}S_{34} - 4T_{34}$	$-\frac{\sqrt{2}}{2}S_{34} + 2\sqrt{2}T_{34} - \sqrt{2}G_{34}$
$\langle 2 $		$2G_{33} + 6G_{44} - 8T_{44} - \frac{2}{3}S_{34} + 4T_{34} + G_{34}$

где S, T и G-параметры тетраэдрических расщеплений, которые возможно определить из решения обратной задачи или использовать рассчитанные *ab initio* значения [6].

Список публикаций:

- [1] R. Marquardt, M. Quack. // *J. Phys. Chem. A*. 2004. V. 108. P. 3166-3181.
 [2] O. N. Ulenikov, E. S. Bekhtereva, O. V. Gromova, et al. // *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*. 2023. V. 284. P. 121796.
 [3] O. N. Ulenikov, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, et al. // *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*. 2019. V. 236. P. 106593.
 [4] T. J. Lee, J. M. L. Martin, P. R. Taylor. // *J. Chem. Phys.* 1995. V. 102(1). P. 254-261.
 [5] O. N. Ulenikov, E. S. Bekhtereva, S. Albert, S. Bauerecker, H. M. Niederer, and M. Quack. // *J. Phys. Chem.* 2014. V. 141. P. 044316.
 [6] H.H. Nielsen. // *Rev. Modern Phys.* 1951. V. 23. P. 90–136.

Спектр излучения диодного лазера при СВЧ модуляции тока инжекции

Дмитриева Лейла Рамисовна

Савинов Константин Николаевич, Котина Дарья Михайловна

Новосибирский государственный технический университет

Дмитриев Александр Капитонович, д.ф.-м.н.

dmitrieva-leyla@mail.ru

Квантовые стандарты частоты применяются в различных областях науки и техники. Наиболее распространенными в наши дни являются рубидиевые часы, в основе которых лежит явление когерентного пленения населенности (КПН) [1, 2]. Накачка КПН осуществляется двумя спектральными компонентами, отстоящими друг от друга на частоту часового перехода 6,835 ГГц.

Для достижения эффективной СВЧ модуляции необходимо выполнение условия согласования длины внешнего резонатора лазера с частотой СВЧ модуляции [3, 4]. При изменении частоты СВЧ модуляции тока инжекции лазера с внешним резонатором, образованным дифракционной решеткой, была обнаружена осциллирующая зависимость амплитуды боковых компонент. При определенных значениях частоты амплитуда боковых компонент была близка к нулю, в том числе на необходимой для накачки КПН резонансов – 3,42 ГГц [5]. В данной работе будет рассмотрена зависимость амплитуды боковых полос спектра от частоты СВЧ модуляции при изменении тока инжекции диодного лазера с внешним резонатором. Схема и подробное описание используемого лазера содержится в работе [5].

В данной работе была получена зависимость спектра от частоты модуляции в широком диапазоне частот СВЧ генератора – от 2.8 до 3.8 ГГц., с шагом измерения 0.01 ГГц. Данная зависимость была получена для значений тока инжекции полупроводникового лазера: 52 мА (вблизи порога), 57 мА, 62 мА, 67 мА.

При токе 52 мА (*рис.1*) амплитуды боковых компонент достигают половины значения амплитуды несущей в отсутствие модуляции. На участках плавного роста (до 3,12 ГГц) и спада (после 3,38 ГГц) амплитуд боковых компонент в зависимости наблюдаются осцилляции с периодом 0,05-0,07 ГГц, причем как для боковых, так и для несущей компоненты. В зависимости амплитуды ВЧ компоненты наблюдается два максимума шириной около 0,05 ГГц, тогда как в зависимости амплитуды НЧ компоненты виден только один максимум, шириной 0,1 ГГц. В местах минимума амплитуды боковых полос их значение падает до 10% от максимального. В диапазоне частот от 3,32 до 3,74 ГГц абсолютная величина боковых компонент остаётся низкой, что фактически может быть недостаточным для наблюдения КПН-резонанса, который требователен к интенсивности. Также наблюдаются явные осцилляции компонент до и после “полки”. Кроме этого, при малом токе накачки боковые компоненты совершают перескок, который удалось отследить по пилообразному напряжению. Этот фактор дополнительно ухудшает стабильность лазерного излучения.

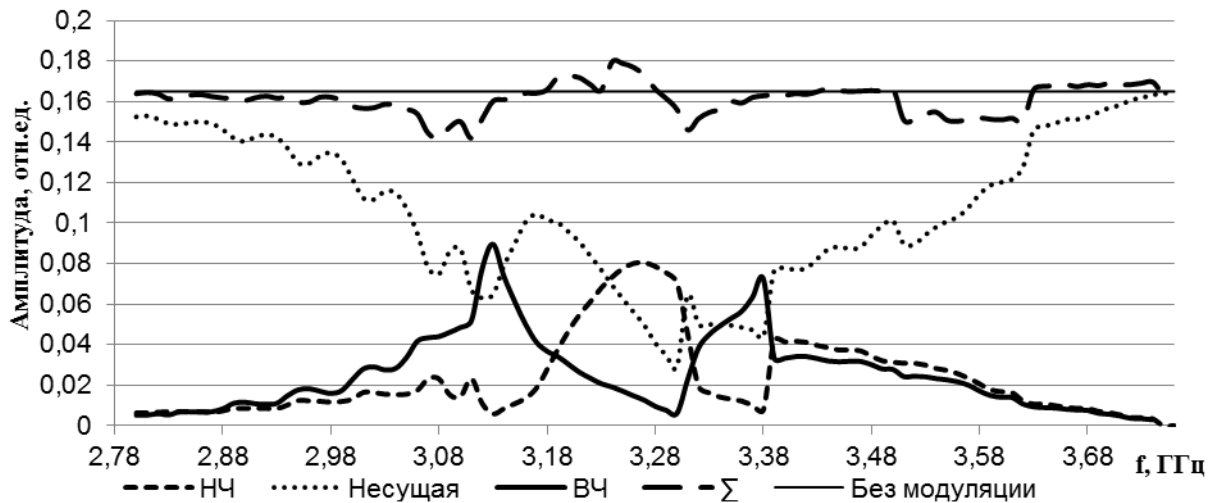


рис.1 Зависимость амплитуды боковых полос спектра и несущей от частоты модуляции. Ток инжекции 52 мА.

Известно [6], что при увеличении тока инжекции частота излучения лазера падает ступеньками с шагом равным межмодовому интервалу. При значении частоты модуляции 3,38 ГГц спектр совершает скачок в красную область на величину межмодового интервала. Мы связываем это с возрастанием вклада СВЧ модуляции в эффективный инжекционный ток при увеличении частоты модуляции.

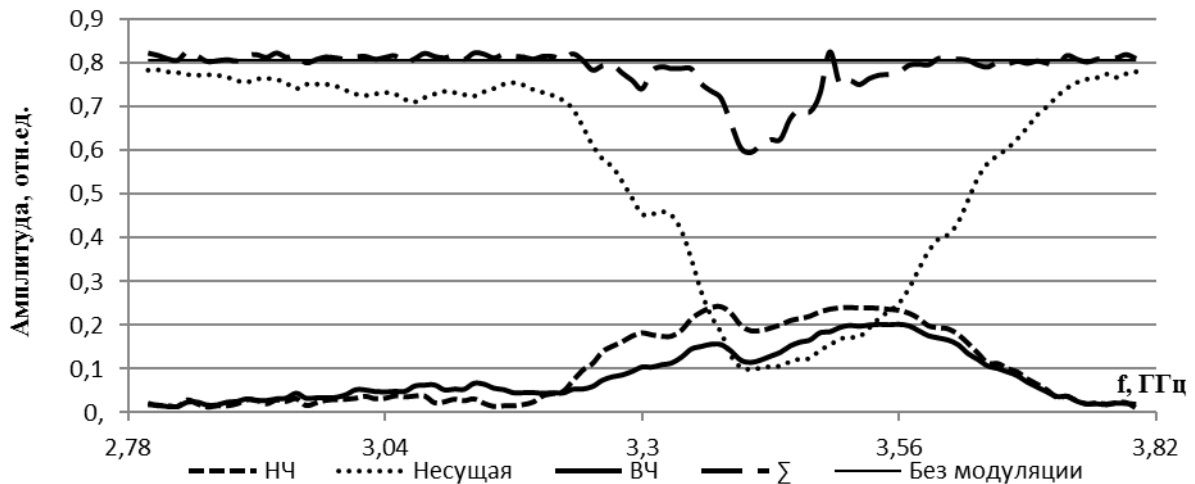


рис.2 Зависимость амплитуды боковых полос спектра и несущей от частоты модуляции. Ток инжекции 67 мА.

С увеличением силы тока накачки магнитуда осцилляций амплитуд компонент существенно падает, пропадает перескок между компонентами. Мы связываем это с тем, что относительный вклад СВЧ сигнала становится меньше, чем в предыдущем случае. При силе тока 67 мА (рис.2) виден практически гладкий контур эффективной модуляции шириной ~0,5 ГГц. Центр наблюдаемого контура смещается в высокочастотную область. Два провала в нём на частотах 3,33 ГГц и 3,41 ГГц отличаются от максимального значения примерно на 22% и в абсолютных значениях остаются высокими, на уровне 0,19. То есть, на необходимой нам частоте модуляции 3,42 ГГц уровень интенсивности будет, скорее, достаточным для регистрации КПП-резонансов.

Для разных значений силы тока инжекции наблюдалось явное ослабевание осциллирующего характера амплитуд, и при силе тока 67 мА получен широкий гладкий контур охватывающий диапазон частот модуляции ~0,5 ГГц, что существенно снижает критерии на стабилизацию длины резонатора. Помимо этого, выросла абсолютная величина амплитуд и, соответственно, эффективность модуляции, что в дальнейшем будет использовано для накачки КПП-резонансов в ячейке с рубидием.

Список публикаций:

- [1] Arimondo E., Orriols G. // *Lettere Al Nuovo Cimento*. 1976. V. 17. P. 333.
- [2] Alzetta G., Gozzini A., Moi M., Orriols G. // *Il Nuovo Cimento*. 1976. V. 36. P. 5.
- [3] Hollberg L. and Ohtsu M. // *Appl. Phys. Lett.*. 1988. V. 53. P. 944.
- [4] Багаев С. Н., Волков В. Г., Ивашико Д. Ю., Матюгин Ю. А., Фатеев Н. В. // *Квантовая электроника*. 1999. Т. 26. С. 109.
- [5] Исакова А.А., Савинов К.Н., Головин Н.Н., Алтынбеков Н.Ж., Вишняков В.И., Дмитриев А.К. // *Квантовая электроника*. 2017. Т. 47. С. 610.
- [6] Zibrov S. et al // *IEEE Journal of Quantum Electronics*. 2020. V. 56. P. 2000608-1.

Развитие гибридной модели для расчета плазмонов с переносом заряда в комплексных системах

Еремкин Егор Валерьевич

Фёдоров Александр Семёнович, Высотин Максим Александрович

Сибирский федеральный университет

Фёдоров Александр Семёнович, д.ф.-м.н.

eremkin.e.v@yandex.ru

Плазмоны с переносом заряда (СТР) возникают в системах, состоящих из двух или более металлических наночастиц, соединенных проводящим мостиком (линкером) [1]. В таких системах свободные заряды перемещаются между наночастицами, что приводит к появлению осцилляций. Было показано, что в случае тонких мостиков генерируется узкий плазмонный пик с резонансом в ближней ИК-области спектра [2].

Ранее часто СТР исследовались в димерах, в то время как работы, описывающие более сложные массивы, практически отсутствуют [3]. В то же время кластеры наночастиц, соединенных проводящими линкерами, довольно часто получают в экспериментах по синтезу, особенно методами мокрой химии [4]. Для того чтобы идти в ногу с экспериментальными работами, в данной работе используется "статистический" подход, в котором образование большого набора кластеров наночастиц, соединенных линкерами, описывается простым методом на базе молекулярной динамики (MD). Таким образом, спектральные свойства плазмонов оцениваются для целого набора возможных структур, вместо того чтобы фокусироваться на предварительно выбранной идеализированной структуре, что часто имело место в более ранних работах СТР.

Для изучения СТР в сгенерированных кластерах используется гибридная модель расчета плазмонов с переносом заряда, представленная в работе [3]. Для нахождения плазмонных частот кластера находятся собственные числа системы уравнений вида (1):

$$Q_j = -\frac{1}{\alpha} \sum_k \left[\sum_{s \neq k, j} \left(Q_s \left(\frac{1}{R_{sj}} - \frac{1}{R_{sk}} \right) + (Q_j - Q_k) \left(\frac{1}{R} - \frac{1}{R_{jk}} \right) \right) \right], \quad \alpha = \frac{L^2 m^*}{2\pi f \epsilon^2} \quad (1)$$

где Q_j – заряд наночастицы, R – радиус наночастицы, R_{jk} – расстояние между двумя наночастицами, L – длина линкера, m^* – эффективная масса, e – заряд электрона, k и j – наночастицы связанные линкером.

В рамках MD метода сгенерированы наборы кластеров 2-х типов: набор, сгенерированный с параметрами, моделирующими высокую концентрацию линкеров в растворе, и набор с низкой концентрации.

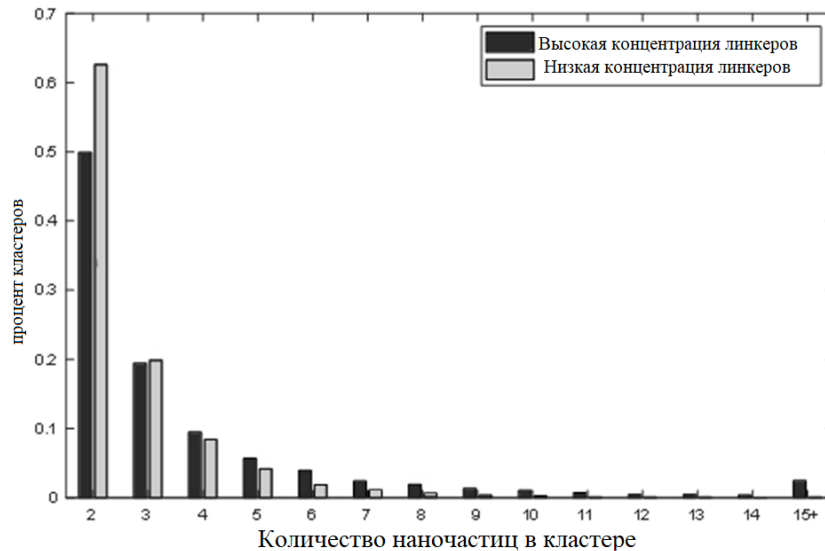


рис.1 Содержание кластеров с различным содержанием наночастиц для разных концентраций линкеров

Применяя гибридную модель расчета плазмонов к полученным наборам кластеров, получаем набор плазмонных частот. На рисунке 2 видно, что распределение полученных частот неравномерно, наблюдается несколько пиков, величина которых отличается для разных концентраций.

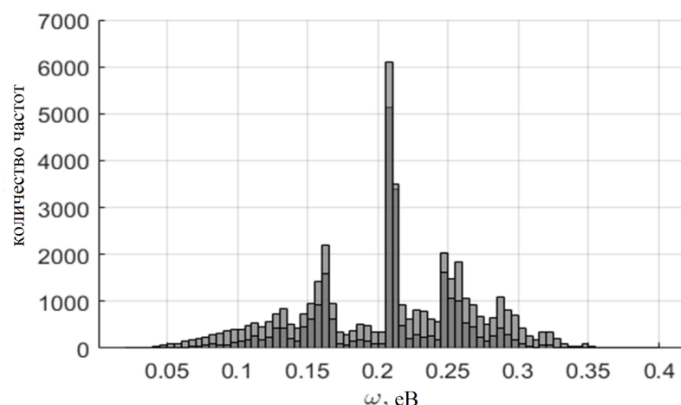


рис.2. Сравнение распределения плазмонных частот для наборов кластеров 2-х типов: светло-серая – высокая концентрация линкеров, темно-серая – низкая.

Полученное возбуждение ИК-плазмонов может быть широко использовано на практике, особенно в области биосенсоров, где использование ИК-излучения пользуется большим спросом из-за его более низкого поглощения по сравнению с излучением в видимом диапазоне, а также в приборной технике для фотоники и электроники.

Работа была поддержана грантом Российского научного фонда "«Проведение фундаментальных научных исследований и поисковых научных исследований отдельными научными группами» (региональный конкурс)", N23-12-20007.

Список публикаций:

- [1] Koya A. N., Lin J. // *Applied Physics Reviews*. 2017. Т. 4. №. 2. С. 021104.
- [2] Wen F. et al. // *ACS nano*. 2015. Т. 9. №. 6. С. 6428-6435.
- [3] Fedorov A. S. et al. // *The Journal of Chemical Physics*. 2021. Т. 154. №. 8. С. 084123.
- [4] Jiang N., Zhu T., Hu Y. // *Microchimica Acta*. 2019. Т. 186. №. 12. С. 1-8.

Диффузионное легирование медью пластины Z-среза монокристаллического ниобата лития при температуре 600 °С

Журин Тимофей Алексеевич

Комов Эдуард, Колмаков Александр Андреевич

Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники

Шандаров Станислав Михайлович, д.ф.-м.н.

timoxazh1@gmail.com

Создание компактных кристаллических ускорителей электронных пучков и оптически управляемых манипуляторов (оптических пинцетов [1, 2]) микро- и наночастицами на основе сегнетоэлектрических кристаллов ниобата лития является возможным благодаря формированию сильных электрических полей, вследствие пироэлектрического и фотогальванического эффектов [3]. Достижимые максимальные значения напряженности электрического поля при использовании для их формирования фотогальванического эффекта определяются наличием в кристалле фоторефрактивных и нефоторефрактивных примесей, и могут изменяться в широких пределах при его легировании соответствующими ионами [4]. Максимальные значения фотовольтаических полей достигаются при легировании монокристаллов LiNbO_3 ионами Fe и Cu, увеличивающими их фоторефрактивную чувствительность.

В настоящем сообщении представлено описание проведенного процесса диффузионного легирования медью пластины Z-среза монокристаллического ниобата лития при температуре 600 °С и приведены результаты определения средней концентрации внедренных ионов в зарядовых состояниях Cu^{2+} и Cu^+ по спектральным зависимостям оптического поглощения полученного образца $\text{LiNbO}_3:\text{Cu}$.

В экспериментах использовались оптически полированные пластины Z-среза из конгруэнтного ниобата лития, имеющие размеры $2 \times 11,4 \times 6,5 \text{ мм}^3$ по осям x, y и z, соответственно. Перед напылением медной пленки измерялся спектр оптического пропускания образца в диапазоне 200÷1100 нм с помощью спектрофотометра GENESYS 2, представленный на рис. 1 кривой 1. Плёнки меди наносились на оптически полированную поверхность пластины с двух сторон методом магнетронного распыления и имели толщину 400 нм. Далее образец зажимался между двумя пластинами нелегированного LiNbO_3 и помещался в трубчатую электропечь на карбидокремниевых нагревателях. Нагрев образца осуществлялся со скоростью 300 °С/ч (5 °С/мин) до

температуры 600 °С. Диффузия происходила при данной температуре в течение 5 часов, с последующим естественным охлаждением за время порядка 12 часов. Все операции по отжигу образцов проводились в воздушной атмосфере. После диффузии остатки плёнки стравливались с помощью 70% раствора уксусной кислоты при температуре 80°С. После стравливания остатков пленки образец промывался водой. Далее проводились повторные измерения спектра его оптического пропускания, результаты которого показаны на рис. 1 кривой 2.

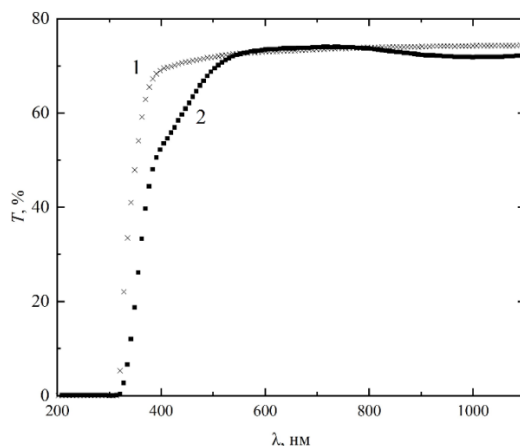


рис.1. Спектры оптического пропускания чистого (кривая 1) и легированного медью (кривая 2) образца ниобата лития (LiNbO_3)

Полученный образец $\text{LiNbO}_3:\text{Cu}$ характеризуется равномерной светло-жёлтой окраской и уменьшенным оптическим пропусканием на длинах волн $\lambda < 550$ нм и $\lambda > 800$ нм, по сравнению с исходными значениями, наблюдавшимися до проведения диффузии. Из представленных на рис. 1 данных по известной методике [5] были определены усредненные по толщине легированного образца спектральные зависимости показателя поглощения α_0^λ . Это позволило оценить среднюю концентрацию ионов Cu^{2+} и Cu^+ , внедренных в него в процессе диффузии, с использованием следующих соотношений [6]:

$$c_{\text{Cu}^+} = 7,9 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-2} \alpha_0^{477 \text{ нм}}, \quad c_{\text{Cu}^{2+}} = 1,2 \cdot 10^{24} \text{ м}^{-2} \alpha_0^{1040 \text{ нм}}, \quad (1)$$

как $c_{\text{Cu}^+} = 7,9 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-3}$ и $c_{\text{Cu}^{2+}} = 1,2 \cdot 10^{24} \text{ м}^{-3}$.

Оценка однородности распределения концентрации ионов Cu^+ в кристалле $\text{LiNbO}_3:\text{Cu}$ производилась по зависимости его оптического пропускания для лазерного излучения с $\lambda = 532$ нм, распространяющегося вдоль оси Z, от координаты y. Для этого образец смещался вдоль кристаллографической оси Y относительно лазерного пучка, мощность которого измерялась с помощью фотодиода ФД-24К и цифрового микроамперметра В7-40. Измеренная зависимость коэффициента пропускания $T(y)$ показана точками на рис. 2. Как из него видно, степень неоднородности распределения концентрации ионов Cu^+ превосходит ошибки эксперимента и должна приниматься во внимание. Оценки показывают, что показатель поглощения образца $\text{LiNbO}_3:\text{Cu}$, полученного диффузией меди из двух пленок с толщиной 400 нм в течение 5 часов при температуре 600 °С, имеет среднее значение $\alpha_0^{532 \text{ нм}} = 25,2 \text{ м}^{-1}$.

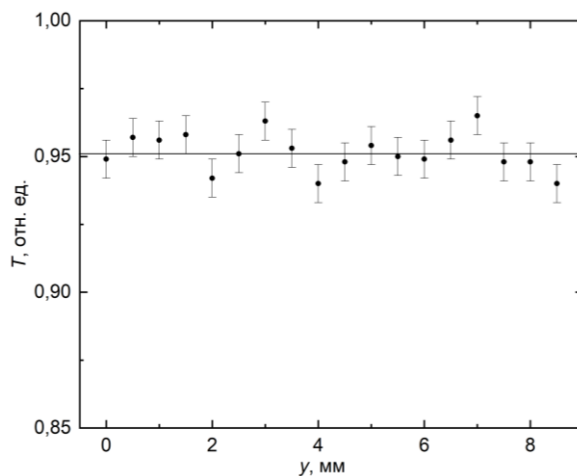


рис. 2. Зависимость от координаты y для коэффициента пропускания света с $\lambda = 532$ нм вдоль оси Z в середине образца $\text{LiNbO}_3:\text{Cu}$, нормированного на пропускание нелегированного образца с такой же толщиной $d = 2$ мм. Точки – эксперимент, прямая – среднее значение $T_{av} = 0,951$.

Таким образом, внедрение ионов меди в кристалл конгруэнтного ниобата лития методом диффузионного легирования при температуре 600 °С в течение 5 часов позволило получить образец $\text{LiNbO}_3:\text{Cu}$ Z-среза со средней концентрацией $c_{\text{Cu}^+} = 7,9 \cdot 10^{22}$ м⁻³ и $c_{\text{Cu}^{2+}} = 1,2 \cdot 10^{24}$ м⁻³ и существенно повысить его фотогальванические характеристики и фоторефрактивную чувствительность.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки и высшего образования Российской Федерации в рамках Госзадания FEWM-2023-012 на 2023 г.

Список публикаций:

- [1] J. Matarrubia et al. // *J.Phys. D: Appl. Phys.* 2014. V. 47. art. No. 265101.
 [2] К.М. Мамбетова и др. // *Изв. вузов. Физика.* 2019. Т. 64. № 4. С. 89.
 [3] Kukhtarev N. V., Kukhtereva T. V., Stargell G., Wang J. C. // *J. Appl. Phys.* 2009. V. 106. Art. no. 014111
 [4] Volk T., Wöhlecke M. // *Lithium niobate: defects, photorefraction and ferroelectric switching.* Berlin, Heidelberg: Springer, 2008. 247
 [5] Ю.И. Уханов. «Оптические свойства полупроводников» Под ред. В.М. Тучкевича. - Москва : Наука, 1977. - 366 с.
 [6] Peithmann K., Hukriede J., Buse K., Krätzig E. // *Phys. Rev. B.* 2001. V. 61, No. 7. P. 4 615.

Случайные резонансы в многоатомных молекулах: $\text{H}_2\text{C}=\text{CD}_2$, состояния $(\nu_2=1, A_1)/(\nu_7=2, A_1)$

Кузьминов Данила Андреевич

Глушков Петр

Томский политехнический университет

Бехтерева Елена Сергеевна, д.ф.-м.н.

dak97@tpu.ru

Молекула этилена важна для многочисленных научных и прикладных задач физики, химии, астрофизики, метеорологии, атмосферной оптики. Этилен - это природное ненасыщенное органическое соединение, содержащееся в окружающем воздухе и влияющее на химический состав атмосферы и глобальный климат. В результате реакции с гидроксильным (ОН) радикалом этилен играет значительную роль в химии тропосферы и образовании озона. Этилен является одним из наиболее важных веществ, изучаемых в астрофизике. Он был обнаружен в атмосферах внешних планет Юпитера, Сатурна, Нептуна. Поэтому в течение многих лет молекула этилена и ее различные изотопологи были предметом обширных исследований. Целью данной работы является исследовать резонансные взаимодействия резонирующих состояний $\nu_2=1$ (A_1), $\nu_7=2$ (A_1) в модели эффективных операторов.

Исследуемый спектр высокого разрешения молекулы $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ зарегистрирован в области 1060-2000 cm^{-1} , где расположены полосы ν_2 и $2\nu_7$. С помощью инфракрасного Фурье-спектрометра Bruker IFS-125HR были сняты два спектра, при общих экспериментальных условиях: температуре 294 К и разрешении 0.0025 cm^{-1} . Различие заключается в длине оптического пути – 16 м и 24 м – и давлении – 0,3 мбар и 1,4 мбар, соответственно. Два спектра необходимы для проведения наиболее полного анализа серий переходов с большими значениями квантовых чисел J, K_a , для которых линии становятся слабо интенсивными. На Рисунке 1 приведен обзорный спектр, зарегистрированный с меньшим давлением.

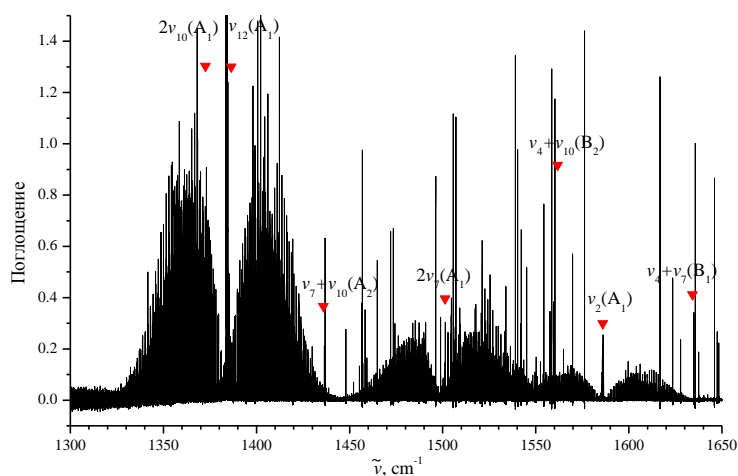


рис. 1. Обзорный спектр молекулы $\text{CH}_2=\text{CD}_2$, зарегистрированный с давлением 0,3 мбар и длиной пути 16 м при комнатной температуре.

Рассматриваемые полосы в заданном диапазоне ν_2 (растяжение C=C) и $2\nu_7$ (первый обертона внеплоскостного колебания $\text{CH}_2=\text{CD}_2$) являются полосами a -типа [2]. Правила отбора для таких полос

$$\Delta J = 0, \pm 1; \Delta K_a = 2n; \Delta K_c = 2n + 1;$$

В дальнейшем будет решена обратная спектроскопическая задача: определены вращательные, центробежные и резонансные параметры, которые входят в систему резонирующих состояний. Эффективный гамильтониан (1) изолированного состояния, в таком подходе, будет использоваться как оператор диагонального блока, [1]:

$$H_{vv} = E^v + \left[A^v - \frac{1}{2}(B^v + C^v) \right] J_z^2 + \frac{1}{2}(B^v - C^v) J^2 + \frac{1}{2}(B^v + C^v) J_{xy}^2 - \Delta_K^v J_z^4 - \Delta_{JK}^v J_z^2 J^2 - \Delta_J^v J^4 - \delta_K^v [J_z^2, J_{xy}^2] - 2\delta_J^v J^2 J_{xy}^2 + H_K^v J_z^6 + H_{KJ}^v J_z^4 J^2 + H_{JK}^v J_z^2 J^4 + H_J^v J^6 + [J_{xy}^2, h_K^v J_z^4 + h_{JK}^v J^2 J_z^2 + h_J^v J^4] + L_K^v J_z^8 + L_{KKJ}^v J_z^6 J^2 + L_{JK}^v J_z^4 J^4 + L_{JJK}^v J_z^2 J^6 + L_J^v J^6 + [J_{xy}^2, l_K^v J_z^6 + l_{KJ}^v J_z^4 J^2 + l_{JK}^v J_z^2 J^4 + l_J^v J^6] + P_K^v J_z^{10} + [J_{xy}^2, p_K^v J_z^8] \quad \#(1)$$

A^v, B^v, C^v – эффективные вращательные параметры с колебательным состоянием v , а другие параметры представляют собой коэффициенты центробежных искажений разного порядка.

В данном диапазоне присутствуют полосы $\nu_{12}(A_1), 2\nu_{10}(A_1), \nu_7+\nu_{10}(A_2), \nu_4+\nu_{10}(B_2), \nu_4+\nu_7(B_1)$ которые будут создавать резонансное возмущение исследуемых полос [1].

Анализ спектра молекулы $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ полос ν_2 и $2\nu_7$ выполнен до максимального значения квантового числа $K_a = 10$, квантовое число в некоторых сериях достигает значений $J^{\max} = 35$.

С помощью метода комбинационных разностей были найдены значения верхних уровней энергии возбуждённых состояний при известных нижних уровнях энергий основного состояния.

Таблица 1. Некоторые экспериментально определённые колебательно-вращательные уровни состояния ($\nu_7=2, A_1$) молекулы $\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -as.

J	K_a	K_c	E
7	7	0	1673.82048
8	7	1	1686.02067
9	7	2	1699.74751
10	7	3	1715.00195
11	7	4	1731.78447
12	7	5	1750.09617
13	7	6	1769.93746
14	7	7	1791.30918
15	7	8	1814.21197
16	7	9	1838.64661
17	7	10	1864.61377
18	7	11	1892.11440
19	7	12	1921.14841
20	7	13	1951.71841

На основании анализа колебательно-вращательного спектра молекулы $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ полос $\nu_2=1 (A_1), \nu_7=2 (A_1)$ определены структуры соответствующих верхних возбуждённых состояний. Построена модель эффективного оператора, рассчитаны главные вклады параметров резонансных взаимодействий типа Кориолиса.

Список публикаций:

- [1] Ulenikov O.N., et al. // Study of the high resolution FTIR spectrum of CH_2CD_2 in the region of 1300–1450 cm^{-1} : The $\nu_{12} (A_1)$ and $2\nu_{10} (A_1)$ bands. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. 2015. V. 161. p. 180-196.
 [2] Harper J., Duncan J. L. // High-resolution infrared study of 1,1-ethylene-D2 in the 2000-to 1200- cm^{-1} region. *Journal of Molecular Spectroscopy*. 1982. V. 95. №. 2. p. 413-431.

Применение современного открытого программного инструментария в XAFS-спектроскопии: теория, моделирование и анализ экспериментальных данных

Макаров Павел Андреевич

Коми научный центр Уральского отделения РАН

makarova@ipm.komisc.ru

Различные методики и техники, основанные на спектроскопии рентгеновского поглощения (XAS — X-ray Absorption Spectroscopy) в настоящее время являются практически стандартным экспериментальным инструментом исследования как в фундаментальной и прикладной науке (физике конденсированного состояния, физической и аналитической химии, материаловедении), так и в промышленности [1]. Этому способствует множество факторов, непосредственно связанных с преимуществами методов XAS, а кроме того — повсеместная распространённость рентгеновских синхротронов — современных источников мощного, когерентного, поляризованного рентгеновского излучения широкого диапазона [2].

Вместе с тем, не следует полагать, что физика взаимодействия рентгеновских лучей с веществом — состоявшаяся наука, развитие которой осуществляется только лишь в плоскости практических применений. Это отнюдь не так, — даже в относительно самой простой технике, а именно — в спектроскопии тонкой структуры рентгеновского поглощения (XAFS — X-ray Absorption Fine Structure) до сих пор ведутся активные работы по разработке актуальной теории, детально описывающей физику явления [3,4]. Особенно это актуально в области XANES (X-ray Absorption Near Edge Structure), являющейся самой характерной частью спектра XAFS. В связи с этим, следует отметить важную роль компьютеров и программного обеспечения, способных существенно помочь исследователям, как в разработке теории и моделировании XAFS-спектров, так и в поиске, анализе и сравнении результатов экспериментов.

Таким образом, в рамках данной работы обсуждается практика использования наиболее актуальных современных языков программирования (Python, C++, C, Fortran), систем компьютерной математики (Mathima), программных библиотек (SciPy, NumPy, pandas, SymPy, Matplotlib, QuTiP, GSL) и средств создания высококачественного контента (Jupyter, LaTeX, Beamer, TikZ, Gnuplot, Asymptote), применимых в научной работе. Перечисленные средства, вообще говоря, являются универсальными и могут применяться учёными, специализирующимися в самых разных областях, однако основное внимание нами уделено использованию данного программного инструментария именно в области научных интересов рабочей группы автора — XAFS-спектроскопии. В связи с этим, в работе также анализируются также специализированные профессиональные базы данных и приёмы работы с ними.

Исследование выполнено при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения N 075-15-2021-1351

Список публикаций:

[1] van Bokhoven J. A., Lamberti C. *X-ray absorption and X-ray emission spectroscopy: theory and applications*. Wiley, 2016. 900 P.

[2] Фетисов Г. В. *Синхротронное излучение. Методы исследования структуры веществ*. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2007. 672 С.

[3] Joly Y. // *Phys. Rev. B*, V. 63. 2001. P. 125120-125129.

[4] Guda S. A., et. al. // *J. Chem. Theory Comput.*, V. 11. 2015. P. 4512-4521.

Ультрамягкая рентгеновская спектроскопия поглощения композитных наноструктурированных материалов и биологических объектов

Петрова Ольга Викторовна^{1,2}

Скандаков Роман Николаевич¹, Бакина Ксения Андреевна¹, Сивков Виктор Николаевич²

¹ *Коми научный центр Уральского отделения российской академии наук*

² *Санкт-Петербургский государственный университет*

teiou@mail.ru

В настоящее время, благодаря появлению мощных синхротронных источников рентгеновского излучения и спектральной аппаратуры высокого разрешения, широкое применение для исследования неорганических и органических материалов на наноуровне получил метод ультрамягкой рентгеновской (УМР) абсорбционной спектроскопии (Near edge X-ray absorption fine structure, NEXAFS) [1], которая характеризуется атомной селективностью, дипольными правилами отбора, высокой чувствительностью к атомному составу и параметрам ближайшего окружения поглотившего рентгеновский квант атома. Структура спектров NEXAFS содержит уникальную информацию об атомном и химическом составе вещества, длине и углах атомных связей,

а также энергии, составе и симметрии свободных электронных состояний. Источником такой информации являются энергетические положения элементов тонкой структуры спектра поглощения и спектральные зависимости сечения поглощения в области NEXAFS.

В УМП области спектра 40-1500 эВ располагаются края поглощения внутренних 1s уровней атомов Li, C, N, O, F, Na, Mg, Al и 2p уровней атомов Si, P, Cl, K, Ca и 3d – переходных металлов, которые являются основой белковых структур и графитизированных биоматериалов (N, C и O), а также входят в состав обширного перечня наноструктурированных сред и нанокомпозитных материалов. Одним из широкодоступных и простым способом проведения NEXAFS исследований твердых тел является метод полного электронного выхода (Total electron yield, TEY), когда исследуемые образцы втираются или закрепляются на поверхности проводящей металлической пластинки. В этом случае метод TEY позволяет проводить исследование поверхности образца на глубину, определяемую глубиной выхода рентгеновских Оже и фотоэлектронов, которая в зависимости от их энергии может варьироваться в пределах 1-10 нм. Существенно, что метод является неразрушающим для большинства твердых тел и при ограничении интенсивности падающего пучка и времени измерения оказывается щадящими по отношению к белковым структурам. Так как метод TEY является поверхностно чувствительными и селективным к атомному составу исследуемого образца, то NEXAFS измерения позволяют исследовать распределение атомов до нескольких монослоев, что делает их эффективными для исследования наноразмерных покрытий, получая информацию одновременно о покрывающем слое, интерфейсе и состоянии материала-подложки.

Такой наноструктурированный материал, как многостенные углеродные нанотрубки (multi wall carbon nanotube, MWCNT), обладающие большой поверхностью, высокой устойчивостью к механическим воздействиям, агрессивным термическим химическим средам, являются востребованным материалом для различных приложений. В частности, как основа для нанесения покрытий из соединений металлов с целью получения катализаторов химических процессов. Аналогичными свойствами обладают графитизированные биологические материалы, имеющие первичную структуру, состоящую из коллагеновых фибрилл. Таким материалом являются морские губки, известные всем как ванные губки, которые при пиролизической обработке в среде аргона до температуры 1200⁰С с сохраняют свою исходную 3D структуру на макро и микроуровне в процессе графитизации при большой площади наноразмерных пор на внешней поверхности. Возможность культивирования морских губок на морских плантациях и воспроизводство ее в больших объемах в природе делает морские губки конкурентным материалом по отношению к MWCNT как основы для производства композитных материалов.

В работе рассматриваются: (i) основные принципы реализации NEXAFS-спектроскопии с использованием синхротронного излучения; (ii) исследования нанокомпозитных материалов на основе многостенных углеродных нанотрубок с наноразмерными покрытиями соединениями Fe и Cr [2-3]; (iii) особенности применения NEXAFS-спектроскопии для характеристики морских губок до и после высокотемпературной модификаций в инертной атмосфере аргона [4-5].

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ №21-72-10029.

Список публикаций:

- [1] Stöhr J. // *NEXAFS Spectroscopy*: Springer, Berlin, 1992.
- [2] Sivkov, D. V., Petrova, O. V., Mingaleva, A. E. et al // *Nanomaterials*. 2020. V. 10(2). P.374(22)
- [3] Nekipelov, S. V., Mingaleva, A. E., Petrova, O. V. et al // *Cond. Matter and Interphases*. 2022. V. 22(1). P. 84–88.
- [4] Petrenko, I., Summers, A. P., Simon, P. et al // *Science Advances*. 2019. V. 5(10). P. eaax2805(12).
- [5] Petrova, O. V., Sivkov, D. V., Nekipelov, S. V. et al // *Appl. Sci*. 2023. V. 13(1). P. 128(13)

Колебательно-вращательная спектроскопия высокого разрешения полосы $\nu_2+\nu_3$ молекулы метилхлорида CH_3Cl : энергетическая структура и абсолютные

**интенсивности линий
Сидько Сергей Сергеевич**

Томский политехнический университет

Уленев Олэг Николаевич, д.ф.-м.н.

sss60@tpu.ru

Метилхлорид (CH_3Cl) является токсичным, бесцветным и легковоспламеняющимся газом, который широко используется в качестве хладагента и имеет многочисленные промышленные применения. Метилхлорид особенно важен при глобальном изучении атмосферы как основной естественный источник хлора в стратосфере [1], соединения которого участвуют в разрушении озонового слоя [2]. Особый интерес к

изучению метилхлорида возник в последние годы как к одному из хлорорганических соединений, оказывающих негативное влияние на процессы промышленной транспортировки и переработки нефтепродуктов [3]. Существуют также теоретические исследования, в которых обсуждались поверхности потенциальной энергии, вычисления уровней колебательной энергии и некоторые другие аспекты колебательно-вращательной теории применительно к молекулам аксиальной симметрии, в частности CH_3Cl [4]. В данной работе выполнен анализ положения линий, энергетической структуры и абсолютных интенсивностей линий молекулы $^{12}\text{CH}_3^{35}\text{Cl}$ в области поглощения полосы $\nu_2+\nu_3$.

Спектр высокого разрешения молекулы CH_3Cl был получен в Техническом университете Брауншвайга в районе $1900\text{--}2300\text{ cm}^{-1}$ с использованием Фурье-спектрометра Bruker (прототип ZP2001 IFS125 HR) с оптическим разрешением 0.003 cm^{-1} при температуре 294.45 K и давлении 300 Pa . Специальные условия эксперимента (высокоточный контроль давления и температуры, а также обеспечение минимальных флуктуаций) были реализованы для экспериментального определения абсолютных интенсивностей колебательно-вращательных линий поглощения молекулы $^{12}\text{CH}_3^{35}\text{Cl}$ на основе использования контура спектральной линии Армана-Тран [5]-[7].

Анализ энергетической структуры осуществлялся с помощью метода комбинационных разностей (см., например, в [8]).

В результате были определены положения 294 линий. На их основе определена энергетическая структура верхнего ($\nu_2+\nu_3=1$) симметрии A_1 колебательного состояния. Колебательно-вращательные значения энергий этого состояния использовались для определения параметров эффективного гамильтониана, которые позволили воспроизводить исходные экспериментальные значения энергий с точностью $0,0018\text{ cm}^{-1}$. Из экспериментальных данных были определены также абсолютные интенсивности 275 линий с максимальными значениями квантовых чисел $J=23$ и $K=7$.

Список публикаций:

- [1] Molina M.J. and Rowland F.S. // *Nature*. 1974. V. 249. P. 5933–5937.
- [2] Mcelroy M.B., Salawichs R.J., Wofsy C. and Logan J.A. // *Nature*. 1986. V. 321. P. 759–762.
- [3] Gutzeit J. // *Corrosion* 2000. 2000. P. 135866.
- [4] Grossman A.S., Grant K.E., Blass W.E., Wuebbles D.J. // *J. Geophys. Res.* 1997. V. 102. P. 13651–13656.
- [5] Tran H., Ngo N.H., Hartmann J.–M. // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* 2013. V. 129. P. 199–203.
- [6] Tran H., Ngo N.H., Hartmann J.–M., Gamache R.R., Mondelain D. et al. // *J. Chem. Phys.* 2013. V. 138. P. 034302.
- [7] Tennyson J., Bernath P.F., Campargue A., Csaszar A.G., Daumont L., Gamache R.R. // *Pure Appl. Chem.* 2014. V. 86. P. 1931–1943.
- [8] Ulenikov O.N., Gromova O.V., Bekhtereva E.S., Krivchikova Y.V., Sklyarova E.A., Buttersack T., Sydow C., Bauerecker S. // *J. Mol. Spectrosc.* 2015. V. 318. P. 26–33.

Комплексные исследования НР-модифицированного фуллерита C₆₀

Скандаков Роман Николаевич

Бакина Ксения Андреевна¹, Петрова Ольга Викторовна^{1,2}, Сивков Данил Викторович¹, Макаров Павел Андреевич¹,
Некипелов Сергей Вячеславович¹, Корусенко Петр Михайлович², Сивков Виктор Николаевич¹

¹Коми научный центр Уральского отделения РАН

²Санкт-Петербургский государственный университет

Сивков Виктор Николаевич

scanick@yandex.ru

В работе исследованы модификации фуллерита в процессе баротермической обработки в среде аргона. Чтобы узнать детали структуры модифицированного фуллерита, был проведён комплексный анализ результатов ультрамягкой рентгеновской спектроскопии (NEXAFS и XPS), Рамановской спектроскопии, а также РЭМ.

Для приготовления образцов использовались фуллериты C₆₀ чистотой 99.98 % в виде кристаллического порошка с размерами кристаллитов 0.05—0.5 мм. Образцы для исследования методом ТЕУ готовились методом прессования порошка фуллерена в поверхность медной пластинки. Образцы фуллерита C₆₀ для исследования методом прямого фотопоглощения готовились методом термического испарения (сублимации) фуллерита в вакууме с танталовой лодочки на свободную титановую пленку толщиной порядка 220 нм, закрепленную оптическим контактом на круглое отверстие диаметром 1 мм в медном держателе. Для приготовления модифицированных баротермической обработкой образцов использовался фуллерит C₆₀ чистотой 99.98 % (ЗАО «Фуллерен-центр», г. Нижний Новгород) растертый в ступке в течении 20 минут в гексане и спрессованный в таблетки с диаметром 20 мм и толщиной 3 мм и подвергнутый

высокотемпературной газостатической обработке (Hot Isostatic Pressure — HIP), в атмосфере аргона, при давлении 1000 атм и в различных температурных режимах вблизи и за границей термической устойчивости фуллерена. Используемая газостатическая установка содержала многоуровневый рабочий столик, на который помещались обрабатываемые образцы и там же находились термодатчики для контроля температуры. По высоте установки имелся градиент температур около 200 К, что позволяло одновременно нагружать несколько образцов и проводить HIP-обработку при разных температурах. В ходе HIP обработки были получены образцы, синтезированные при постоянном давлении в 1000 атм в среде аргона и температурах 950, 1020, 1160 и 1260 К при выдержке 3 часа.

Полученные методами ультрамягкой рентгеновской спектроскопии (NEXAFS и XPS) результаты в сопоставлении с данными рентгеновской дифрактометрии, Рамановского рассеяния и электронной микроскопии, а также сравнения с данными по моделированию слияния молекул C_{60} в нанокapsулу C_{120} [1], позволяют сделать следующие выводы: 1) структура получаемого материала представляет собой последовательности хаотически ориентированных нанокapsул с графеновой поверхностью, связанных между собой силами Ван-дер-Ваальса; 2) средние размеры нанокapsул составляют ~2.5 нм а их диаметры ~0.68—0.98 нм; 3) формирование нанокapsул осуществляется путем первоначальной $[2 + 2]$ реакции циклоприсоединения с последующими GSW-преобразованиями, приводящими к $2C_{60} \rightarrow C_{120}$ процессу слияния.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ №21-72-10029.

Список публикаций:

[1] *Seungwu Han, Mina Yoon, Savas Berber, Noejung Park, Eiji Osawa, Jisoon Ihm, and David Tománek. // Physical Review B. 2004. V. 70, № 11, P.4*

Разработка программного комплекса для анализа электронных спектров

Хаметова Элина Фанилевна

Бакиева Ольга Ринатовна

Удмуртский государственный университет

Бакиева Ольга Ринатовна, к.ф.-м.н.

elinaphanilevna851@gmail.com

На сегодняшний день для исследования микро- и наноструктурных материалов используются спектральные методы, которые основаны на воздействии на поверхность электронного, фотонного, нейтронного или ионного излучения. Настоящая работа посвящена методам электронной спектроскопии, которые используются при исследовании поверхности образца с помощью моноэнергетичного потока электронов. В результате эксперимента регистрируется спектр в шкале кинетических энергий вторичного электрона либо в шкале потерь его энергии.

Электронные спектры содержат ряд особенностей, подробнее их можно рассмотреть на примере экспериментальных данных полученных с поверхности сплава CuMn (экспериментальные данные получены на оже микроанализаторе Jamp 10S, Jeol) (рис. 1). В шкале кинетических энергий, с низкоэнергетичной стороны наблюдаются пики, вызванные оже переходами. Энергия вылетающего с поверхности оже-электрона позволяет однозначно идентифицировать химическую сортность атома, а количественный анализ оже спектров дает информацию об относительной концентрации химических элементов в пределах анализируемого слоя. В то же время электронный спектр можно рассматривать в шкале потерь энергии вторичного электрона. В этом случае началом отсчета будет энергия, при которой электроны отражаются от поверхности без потери энергии – пик упруго отраженных электронов самый интенсивный в правой части спектра (рис.1). Далее, происходят процессы потери энергии на возбуждение плазмонных колебаний и верхних уровней в электронной подсистеме образца. Анализ данной области электронного спектра позволяет определять электронную структуру исследуемой поверхности. С увеличением энергетических потерь электронов наблюдаются скачки интенсивности спектра, обусловленные возбуждением внутренних уровней атома. Энергия потери затраченной на возбуждение внутреннего уровня атома вещества является характеристической величиной и позволяет определять химическую сортность, а также химическое состояние атома. За краями характеристических потерь наблюдаются осцилляции интенсивности спектра, которые формируются в результате когерентного рассеяния вторичного электрона на локальном атомном окружении. Анализ данной области электронного спектра позволяет получать информацию о длинах химической связи, координационных числах и параметрах тепловой дисперсии атома.

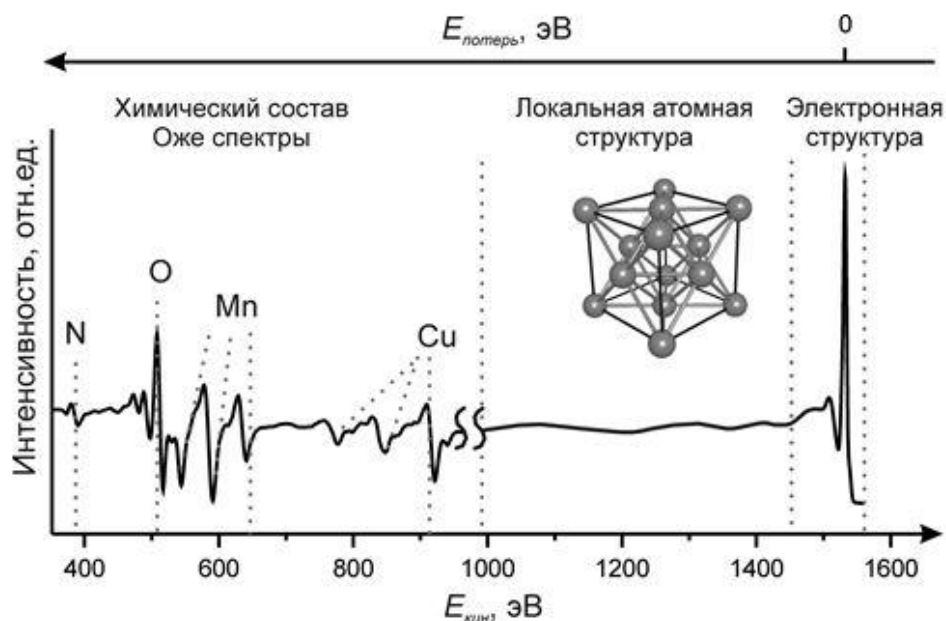


рис. 1. Пример электронного спектра, данные получены с поверхности сплава CuMn.

Таким образом, анализ электронного спектра позволяет проводить комплексное исследование поверхности – от определения элементного состава, до атомной и электронной структуры. На данный момент разработаны теоретические подходы, описывающие процессы, регистрируемые в электронных спектрах, а также современное оборудование, позволяющее получать экспериментальные данные в едином спектре от нуля кинетических энергий, до нуля энергии в шкале потерь. Однако единого программного комплекса позволяющего проводить анализ таких спектров – нет. Целью настоящей работы является разработка программного комплекса позволяющего проводить полный анализ электронных спектров – от определения элементного состава, до атомной и электронной структуры. На данный момент написано несколько модулей, с помощью которых по электронному спектру определяется химический состав исследуемой поверхности, предполагается его атомное строение (рис.2). Предложен алгоритм, позволяющий в дальнейшем перейти на методы машинного обучения. Программный комплекс написан на языке Python.

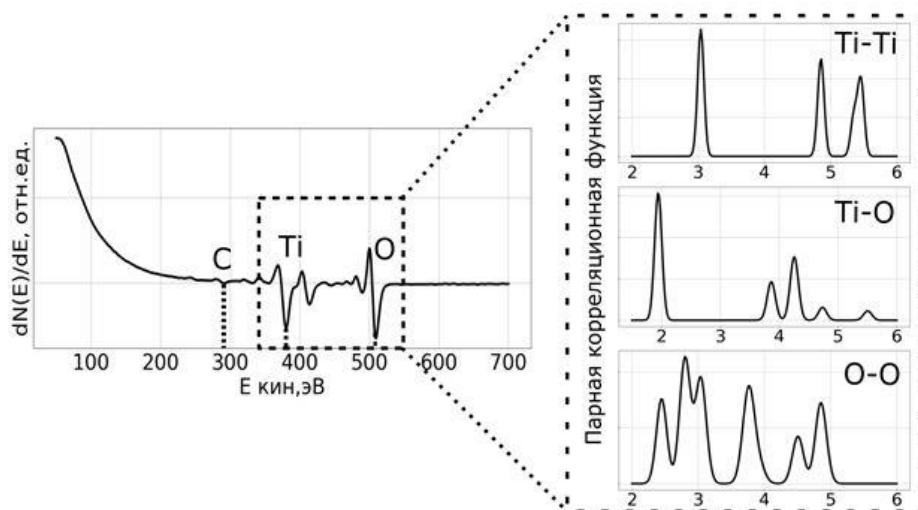


рис. 2. Результат работы модулей - определение химического состава исследуемой поверхности и предполагаемая локальная атомная структура на примере оксида титана (анатаз).

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ №121030100002-0. Исследования выполняли с использованием оборудования ЦКП «Центр физических и физико-химических методов анализа, исследования свойств и характеристик поверхности, наноструктур, материалов и изделий» УдмФИЦ УрО РАН.

Исследование спектров молекул типа сферического волчка на примере $^{13}\text{CD}_4$

Хань Тай

Томский политехнический университет

Громова Ольга Васильевна, д.ф.-м.н.

2719616721@qq.com

Молекула CD_4 представляет собой сферический волчок, имеющую тетраэдрическую структуру и симметрию, изоморфную точечной группе симметрии T_d . Как следствие, ее девять колебательных координат обладают следующей симметрией: $q_1(A_1)$ - невырожденная, $q_2(E)$ - дважды вырожденная, $q_3(F_2)$ и $q_4(F_2)$ - трижды вырожденные координаты. Известно [1], что колебательно-вращательные состояния таких молекул разбиваются на группы (полиады) более или менее изолированных состояний, которые взаимодействуют друг с другом внутри полиады (из-за приблизительного соотношения гармонических частот $\omega_1 \approx \omega_3 \approx 2\omega_2 \approx 2\omega_4$).

В соответствии с общей колебательно-вращательной теорией [2], гамильтониан произвольной многоатомной молекулы может быть сведен к так называемому эффективному гамильтониану, или, в более общем случае, к эффективной операторной матрице вида [3,4]

$$H^{\text{vib.-rot.}} = \sum_{a,b} |a\rangle \langle b| H^{a,b}, \quad (1)$$

где $|a\rangle$ и $\langle b|$ - функции колебательных состояний; операторы $H^{a,b}$ зависят только от вращательных операторов J_α , и суммирование производится по всем вырожденным и/или взаимодействующим колебательным состояниям. Для диады взаимодействующих полос ν_2 и ν_4 молекулы XY_4 (симметрия T_d) уравнение (1) может быть переписано в следующей форме: [5]

$$H^{\text{vib.-rot.}} = H_{\text{gr.}}^{\text{vib.-rot.}} + H_{\text{dyad}}^{\text{vib.-rot.}}, \quad (2)$$

$$H_{\text{gr.}}^{\text{vib.-rot.}} = \sum_{\Omega K} |0000, A_1\rangle \langle 0000, A_1| R^{\Omega(KA_1)} Y_{(0000, A_1), (0000, A_1)}^{\Omega(KA_1)}, \quad (3)$$

$$H_{\text{dyad}}^{\text{vib.-rot.}} =$$

$$\sum_{\Gamma} \sum_{\Omega K} |0100, E\rangle \langle 0100, E| R^{\Omega(K\Gamma)} Y_{(0100, E), (0100, E)}^{\Omega(K\Gamma)} + \sum_{\Gamma} \sum_{\Omega K} [|0001, F_2\rangle \langle 0001, F_2|]^{\Gamma} R^{\Omega(K\Gamma)} Y_{(0001, F_2), (0001, F_2)}^{\Omega(K\Gamma)} +$$

$$\sum_{\Gamma} \sum_{\Omega K} [|0100, E\rangle \langle 0001, F_2|]^{\Gamma} R^{\Omega(K\Gamma)} Y_{(0100, E), (0001, F_2)}^{\Omega(K\Gamma)} +$$

$$\sum_{\Gamma} \sum_{\Omega K} [|0001, F_2\rangle \langle 0100, E|]^{\Gamma} R^{\Omega(K\Gamma)} Y_{(0100, E), (0001, F_2)}^{\Omega(K\Gamma)}, \quad (4)$$

где $|0000, A_1\rangle$, $|0100, E\rangle$ и $\langle 0001, F_2|$ - симметризованные колебательные функции основного и двух возбужденных колебательных состояний; $R_{\sigma}^{\Omega(Kn\Gamma)}$ - симметризованные вращательные операторы, Ω - суммарная степень вращательных операторов J_α ($\alpha = x, y, z$) в индивидуальном операторе R ; K - ранг этого оператора, Γ - его симметрия в группе симметрии T_d , а n различает возможные различные операторы $R_{\sigma}^{\Omega(Kn\Gamma)}$, имеющие одинаковые значения Ω , K и Γ . Знак \otimes обозначает тензорное произведение, а значения $Y_{\Omega(Kn\Gamma)}^{\Omega(Kn\Gamma)}$ - спектроскопические параметры разного типа [6].

В работе выполнен высокоточный колебательно-вращательный анализ (положения линий и их интенсивности) ИК-Фурье спектров изотополога $^{13}\text{CD}_4$. ИК-спектры высокого разрешения $^{13}\text{CD}_4$ были зарегистрированы на ИК-спектрометре Bruker IFS125 HR с оптическим разрешением 0.003 см^{-1} и проанализированы в области $800\text{-}1400 \text{ см}^{-1}$, где находится диада ν_2/ν_4 . Был использован образец чистого дейтерированного метана, однако (как видно из рис. 1) в образце присутствовало, по крайней мере, некоторое количество примесей CHD_3 и H_2O . Оценка наличия CHD_3 и H_2O была сделана с помощью процедуры, рассмотренной в [7]. Проинтерпретировано 689/212 переходов для полос ν_4 и ν_2 , что примерно в 5,3 раза больше по сравнению с числом ранее известных в литературе переходов) с $J_{\text{max}} = 23$, соответственно. Последующая взвешенная подгонка экспериментальных переходов с целью определения параметров гамильтониана проводилась с использованием результатов теории изотопо-замещения в модели гамильтониана, учитывающей резонансные взаимодействия между верхними $(0001, F_2)$ и $(0100, E)$ колебательными состояниями. В результате были получен набор из 18 параметров для $(0001, F_2)/(0100, E)$ колебательных состояний молекулы $^{13}\text{CD}_4$, которые воспроизводят положения исходных 901 экспериментальных колебательно-вращательных переходов с $d_{\text{rms}} = 2.59 \times 10^{-4} \text{ см}^{-1}$, что близко к экспериментальным погрешностям в положениях линий в зарегистрированных спектрах и примерно в 1330 раз лучше по сравнению с воспроизведением значений тех же переходов с использованием параметров из [8]. Выполнен анализ 131 экспериментальных колебательно-вращательных линий диады $^{13}\text{CD}_4$ на основе профиля Армана-Тран для моделирования измеренной формы линий и определения экспериментальных абсолютных интенсивностей линий. Определен набор параметров

эффективного дипольного момента $^{13}\text{CD}_4$, который воспроизводит исходные 131 интенсивности линий с $d_{\text{rms}} = 4.21\%$.

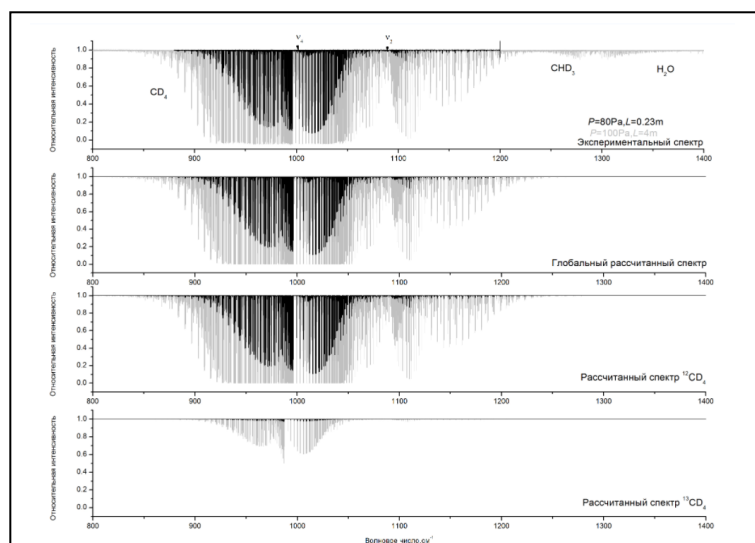


рис.1. Верхняя часть рисунка: Обзорные экспериментально зарегистрированные спектры I (черный) и II (серый) $^{12}\text{CD}_4$ и $^{13}\text{CD}_4$ в области диады полос ν_2/ν_4 , соответственно. Слабые линии, принадлежащие CHD_3 и H_2O (последние были использованы для калибровки), видны в правой части спектра. Три нижних трека показывают смоделированные спектры $^{12}\text{CD}_4$ и $^{13}\text{CD}_4$.

Список публикаций:

- [1] Ulenikov O.N., Bekhtereva E.S., Albert S., Bauerecker S., Niederer H.M., Quack M. // Survey of the high resolution infrared spectrum of methane ($^{12}\text{CH}_4$ and $^{13}\text{CH}_4$): Partial vibrational assignment extended towards 12 000 cm^{-1} . *Journal of Chemical Physics*. 2014. 141. 234302.
- [2] Papousek D., Aliev M.R. // *Molecular vibrational-rotational spectra*, Elsevier, Amsterdam, 1982.
- [3] Ulenikov O.N., He S.G., Onopenko G.A., Bekhtereva E.S., Wang X.H., Hu S.M., Lin H., Zhu Q.S. // High-resolution study of the ($\nu_1 + 1/2\nu_2 + \nu_3 = 13$) polyad of strongly interacting vibrational bands of D_2O . *Journal of Molecular Spectroscopy*. 2000. 204. 216–225.
- [4] Ulenikov O.N., Bekhtereva E.S., Gromova O.V.; Alanko S.; Horneman V.-M.; Leroy C. // Analysis of highly excited "hot" bands in the SO_2 molecule: $2\nu_2 + 3\nu_3 - 2\nu_1$ and $2\nu_1 + \nu_2 + \nu_3 - \nu_2$. *Molecular Physics*. 2010. 108. 1253–1261.
- [5] Koshelev M.A., Velmuzhov A.P., Velmuzhova I.A., Sennikov P.G., Raspopova N.I., Bekhtereva E.S., Gromova O.V., Ulenikov O.N. // High resolution study of strongly interacting $\nu_1(A_1)/\nu_3(F_2)$ bands of MGeH_4 ($M = 76, 74$). *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. 2015. 164. 161–174.
- [6] Champion J.P. // Developpement complet de l'hamiltonien de vibration-rotation adapté à l'etude des interactions dans les molécules toupies sphériques. Application aux bandes ν_2 et ν_4 de $^{12}\text{CH}_4$. *Canadian Journal of Physics*. 1977. 55. 1802–1828.
- [7] Ulenikov O.N., Bekhtereva E.S., Gromova O.V., Belova A.S., Bauerecker S. // On the method of precise abundance determination of isotopologues in a gas mixture. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 2019. 21. 8464–8469.
- [8] Loete M., Hilico J. C., Valentin A., Chazelas J., & Henry L. // Analysis of the ν_2 and ν_4 infrared bands of CD_4 . *Journal of Molecular Spectroscopy*. 1983. 99(1). 63-86.

8 - Квантовая электроника и лазерная физика

Плюхина Анастасия Андреевна, магистрант 1 года обучения

Архангельск, Северный Арктический федеральный университет им. М.В. Ломоносова, естественно-научный

Рассеяние ультракоротких импульсов на молекуле ДНК

Макаров Дмитрий Николаевич, д.ф.-м.н.

e-mail: plyuhina.a@edu.narfu.ru стр. 148

Рассеяние ультракоротких импульсов на молекуле ДНК

Плюхина Анастасия Андреевна

¹ Северный арктический федеральный университет имени М.В. Ломоносова

Макаров Дмитрий Николаевич, д.ф.-м.н.

plyuhina.a@edu.narfu.ru

Развитие современного оборудования для генерации ультракоротких лазерных импульсов (УКИ) предоставляет возможность наблюдать атомные и молекулярные явления в реальном масштабе времени [1]. Значительное количество работ по данной тематике посвящено процессам ионизации и возбуждения мишеней [1,2]. Теория рассеяния ультракоротких лазерных импульсов (УКИ) является основой рентгеноструктурного анализа биомолекул с использованием передовых источников УКИ, однако на сегодняшний день особенности взаимодействия лазерных импульсов рентгеновского диапазона длин волн со сложными молекулярными биологическими структурами недостаточно изучены [3-5].

В основном, исследования по данной тематике сосредоточены на особенностях взаимодействия УКИ с простыми системами, такими как атомы и простые молекулы. Здесь мы показываем, что при рассеянии ультракоротких лазерных импульсов на сложных полимерах биологического происхождения выявляются определенные закономерности взаимодействия УКИ с биомолекулами определенного типа. Полученные результаты отличаются от теории рассеяния непрерывного рентгеновского излучения в веществе. Если считать длительность импульса бесконечно большой, то выбранный нами метод исследования вписывается в хорошо известную теорию рассеяния. Простота полученных в ходе исследования выражений позволяет применять их в рентгеноструктурном анализе. В качестве примера приведены спектры рассеяния аттосекундного лазерного импульса на нуклеотиде дезоксирибонуклеиновой кислоты (ДНК).

Исследование выполнено при поддержке государственного задания Российской Федерации № FSRU-2021-0008.

Список публикаций:

[1] Krausz F., Ivanov M. *Attosecond Physics* // *Rev. Mod. Phys.* 2009, V. 81, 163.

[2] A.M. Zheltikov. *The Raman effect in femto- and attosecond physics* // *Phys.Usp.* 2011, V. 54, 29

[3] Makarov D. N., Matveev V. I., Makarova K. A., *Dynamic target ionization using an ultrashort pulse of a laser field* // *Technical Physics Letters*, 2014, V. 40 (9), 773-775.

[4] Makarov D.N., Eseev M.K., Makarova K.A. *Analytical wave function of an atomic electron under the action of a powerful ultrashort electromagnetic field pulse* // *Optics Letters*. 2019. V. 44(12). 3042-3045.

[5] Makarov D., Kharlamova A, *Scattering of X-ray Ultrashort Pulses by Complex Polyatomic Structures* // *Int. J. Mol. Sci.* 2022. V. 23(1), 163.

9 - Физическая химия, химическая физика

Билокова Мария Романовна, 3 курс
Екатеринбург, Уральский федеральный университет, департамент фундаментальной и прикладной физики
Поверхностное натяжение изобутана и определение состава смеси изобутан-водород
Андбаева Валентина Николаевна, к.ф.-м.н.
e-mail: bilukovamaria@gmail.com стр. 150

Жуйков Данил Андреевич, 3 курс
Красноярск, Сибирский федеральный университет, институт фундаментальной биологии и биотехнологий
Повышение эффективности метода «мокрого» сжигания органических отходов в перексиде водорода с использованием электрического тока
Трифонов Сергей Викторович, к.б.н.
e-mail: zdanil748@gmail.com стр. 151

Лебедев Михаил Сергеевич, с.н.с.
Новосибирск, Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН
Физико-химические основы и примеры практического применения технологии атомно слоевого осаждения
e-mail: lebedev@niic.nsc.ru стр. 152

Самойлова Мария Алексеевна, м.н.с.
Екатеринбург, Институт металлургии УрО РАН, отдел материаловедения
Вязкость щёлочноборатных расплавов $\text{Na}_2\text{O}-\text{B}_2\text{O}_3$ в зависимости от состава
Хохряков Александр Александрович, д.х.н.
e-mail: mari.makarenko.1993@mail.ru стр. 153

Чечина Мария Сергеевна, 2 курс
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
Влияние давления на электрические характеристики органических пленок
Шпанько Светлана Павловна, к.х.н.
e-mail: mchechina@sfedu.ru стр. 155

Чечина Мария Сергеевна, 2 курс
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
Релаксационная поляризация в органических пленках
Сидоренко Евгений Никифорович, к.ф.-м.н.
e-mail: mchechina@sfedu.ru стр. 154

Швец Анатолий Сергеевич, аспирант 3 года обучения
Томск, Томский политехнический университет, инженерная школа энергетики
Влияние площади поверхности и структуры слоя биомассы на характеристики микроволнового пиролиза
Стрижак Павел Александрович, д.ф.-м.н.
e-mail: ass74.shvets@yandex.ru стр. 157

Ширяева Анастасия Андреевна, магистрант 2 года обучения
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
Кристаллическое строение комплексов Cu(II) и Co(II) с $n\text{-}\{2\text{-}[(\text{e})\text{-}(4\text{-циклогексилфенил})\text{иминометил}]\text{фенил}\}\text{-}4\text{-метилбензен-1-сульфонамидом}$
Власенко В.Г., д.ф.-м.н.
e-mail: anastasia.shiryeva00@mail.ru стр. 159

Поверхностное натяжение изобутана и определение состава смеси изобутан-водород

Билукова Мария Романовна

Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина

Андбаева Валентина Николаевна

bilukovamaria@gmail.com

Поверхностное натяжение является ключевым фактором в поверхностных явлениях, которое может быть определено по экспериментальным данным капиллярной постоянной a^2 и разности ортобарических плотностей жидкой и паровой фаз $\Delta\rho$ [1]:

$$\sigma = 0,5ga^2\Delta\rho \quad (1)$$

Здесь g – ускорение свободного падения в месте проведения эксперимента. Как видно из уравнения (1) для определения поверхностного натяжения необходимо знать плотности жидкой и паровой фаз исследуемой системы (т.е. знать концентрацию компонентов смеси).

Перспективным, но пока еще широко не распространенным видом бинарного топлива, является смесь углеводород–водород, сжигание которой позволяет снизить выбросы углекислого газа и других продуктов горения в атмосферу. В данной работе приводятся результаты определения концентрации жидкой и паровой фаз раствора изобутан–водород. В виду отсутствия уравнения состояния исследуемой системы, концентрация водорода в изобутане определялась по равновесному значению давления, используя экспериментальные данные на линии фазового равновесия раствора изобутан–водород [2]. Для определения концентрации водорода в жидкой фазе раствора эти данные аппроксимированы уравнением вида:

$$x_L = A(T) \cdot (p - p_{s0}), \quad (2)$$

где p_{s0} – давление насыщения изобутана [3]. Функции $A(T)$ представлена в виде:

$$A(T) = \sum_{i=0}^3 \alpha_i \tau^i \quad (3)$$

Здесь $\tau = T/T_c$, $T_c = 407.81$ К – температура в критической точке изобутана [3], коэффициенты найдены с помощью метода наименьших квадратов: $\alpha_0 = -121.465$ моль %/МПа, $\alpha_1 = 455.2518$ моль %/МПа, $\alpha_2 = -566.3878$ моль %/МПа, $\alpha_3 = 235.6771$ моль %/МПа. Уравнение (2) описывает экспериментальные данные работы [2] с погрешностью, не превышающей погрешность эксперимента.

Концентрация в газовой фазе раствора определялась, через константу равновесия: $x_V = K \cdot x_L$. Значения K взяты из работы [2].

Работа выполнена в Институте теплофизики Уральского отделения Российской академии наук.

Список публикаций:

[1] Байдаков В. Г. Межфазная граница простых классических и квантовых жидкостей // Екатеринбург: УИФ «Наука». 1994. 374 с.

[2] Dean M. R., Tooke J. W. Vapor-liquid equilibria in three hydrogen-paraffin systems // *Ind. Eng. Chem.* 1946. V. 38. P. 389-393.

[3] Bücker D., Wagner W. Reference equations of state for the thermodynamic properties of fluid phase n-butane and isobutane // *J. Phys. Chem. Ref. Data.* 2006. V. 35. P. 929-1019.

Повышение эффективности метода «мокрого» сжигания органических отходов в перексиде водорода с использованием электрического тока

Жуйков Данил Андреевич¹

¹*Сибирский федеральный университет*

²*Институт биофизики СО РАН*

Трифонов Сергей Викторович^{1,2}, к.б.н.

zdani1748@gmail.com

Физико-химические методы утилизации отходов органической природы имеют целый ряд преимуществ перед биологическими методами, одни из которых это малое время переработки продуктов обмена, а также простота регулирования процесса. В основе метода «мокрого» сжигания экзометаболитов человека в водной среде пероксида водорода под действием электрического тока лежит тот факт, что молекула H_2O_2 представляет собой диполь, который при наложении на него переменного магнитного поля начинает колебаться в пространстве и активироваться. Данный метод позволяет избавиться от необходимости использовать повышенные температуры и отличные от атмосферного давления показатели. Эти факты обуславливают преимущество метода «мокрого» сжигания перед такими физико-химическими методами как суперкритические водное окисление и процесс Зимпро [1,2]. Возможность эффективного использования продуктов минерализации метаболитов методом «мокрого» сжигания представлены в многолетних исследованиях [3]. Получаемый в итоге газ и минеральный раствор не оказывают токсического действия на растения и могут быть вовлечены в круговоротные массообменные процессы. [4].

Процесс минерализации экзометаболитов в методе «мокрого» сжигания протекает до полного распада молекул пероксида водорода. Окисление экзометаболитов человека длится около 3 ч. Длительность данного процесса можно обусловить тем, что при минерализации могут образовываться соединения, которые могут оказывать ингибирующие или стабилизирующие действие на молекулы пероксида водорода. Ингибирование процесса окисления органических соединений может осуществляться ненасыщенными мономерами и другими акцепторами свободных радикалов в растворе. Стабилизаторами же, могут выступать как органические соединения, так и металлы. Поиск способа сокращения времени процесса с помощью подаваемого активирующего электрического тока представляет практический и научный интерес.

Целью нашей работы было определение влияния частоты и формы активирующего электрического тока на изменение параметров процесса минерализации, таких как: время сжигания, затраченная энергия.

Объектом исследования служил раствор экзометаболитов человека и пероксид водорода. Были проведены сжигания данных растворов с различными параметрами частоты и формы электрического тока, а именно: а) 50 Гц., синусоида; б) 35 Гц., меандр.

Для осуществления процесса минерализации два типа метаболитов человека (плотные и жидкие отходы) смешивали друг с другом в соотношении, согласно данным [5]: 1г. плотных отходов на 10 мл. урины. К полученной массе добавляли пероксид водорода (33%) в соотношении: 4 мл. на 1 г. плотных отходов, 0,5 мл. на 1 мл. урины. Далее через полученную смесь пропускали электрический ток с изменяемым в процессе напряжением. Данный процесс можно разделить на три стадии: 1) Стадия разгона, здесь происходит разогрев заправленной в реактор смеси, при напряжении в электрической цепи равном 150 вольт. 2) Рабочая стадия, является основной во всем процессе минерализации, с напряжением 70 вольт. 3) Стадия дожига, на ней происходит разложение оставшейся в смеси перекиси водорода, при напряжении 100 вольт. Разделение процесса сжигания на данные этапы необходимо для того, чтобы мы могли отследить изменения времени сжигания на том или ином этапе, и увидеть направление дальнейшей работы.

В результате проведения сжиганий экзометаболитов человека при разной частоте и форме тока было выявлено, что совокупное время сжигания, при частоте электрического тока равном 35 Гц, сокращается в 1,17 раз, что касается рабочей (основной) стадии, то ее время сократилось в 1,5 раза.

	50 Гц., синусоида, ч.	35 Гц., меандр, ч.
Стадия разгона	0,23	0,23
Рабочая стадия	2,56	1,7
Стадия дожига	1,7	1,92
Общее среднее	$4,49 \pm 0,68$	$3,85 \pm 0,53$

Говоря об энергопотреблении, стоит отметить преимущество сжигания при 35 Гц., что объясняется уменьшенным временем протекания реакции.

	50 Гц., синусоида, кВт.	35 Гц., меандр, кВт.
ср. энергопотреб.	16,77 ± 2,99	14,19 ± 2,47

Таким образом, в ходе проделанной работы установлено, что частота и форма подаваемого электрического тока влияет на активацию перекиси водорода и, таким образом, влияет на продолжительность процесса минерализации, что может быть связано со структурой самой молекулы H₂O₂.

Исследование выполнено в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (проект № 0287-2021-0042).

Список публикаций:

- [1] Upadhye R. S., Wignarajah K., Wydeven T. // *Environ. Int.* 1993. Vol. 19 (4). P. 381-392.
 [2] Tsuga S., Tako Y., Endo M., Nishidate K., Fukuda S. // *Proc. of the Int. Symp. on Application of a Closed Experimental System to Modeling of 14C Transfer in the Environment. Rokkasho, Aomori, Japan, 2007.* pp. 119-126.
 [3] Tikhomirov A. A., Ushakova S. A., Manukovsky N. S., Lisovsky G. M., Kudenko Y. A., Kovalev V. S., Gribovskaya I. V., Tirrannen L. S., Zolotukhin I. G., Gros J. B., Lasseur Ch. // *Acta Astronautica.* 2003. Vol. 53. P. 249-257.
 [4] Tikhomirov A., Kudenko Yu., Trifonov S., Ushakova S. // *Adv. Space Res.* 2012. Vol. 49. P. 249-253.
 [5] С. В. Трифонов, Ю. А. Куденко, А. А. Тихомиров, В. В. Клевец Перспективы использования "мокрого" сжигания органических отходов в пероксиде водорода для замкнутых систем жизнеобеспечения. // *Химия в интересах устойчивого развития.* . №22. 2014. С. 203-208.

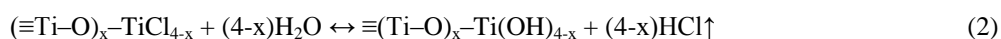
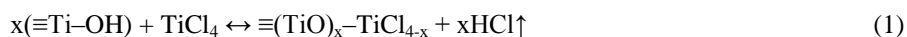
Физико-химические основы и примеры практического применения технологии атомно-слоевого осаждения

Лебедев Михаил Сергеевич

Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН

lebedev@niic.nsc.ru

На протяжении многих лет технологии химического осаждения из газовой фазы (ХОГФ) с непрерывной подачей реагентов позволяли успешно решать задачи получения тонкопленочных покрытий самого различного состава, толщины и функционального назначения. Но с определенного момента без преувеличения технологией мирового значения стал метод атомно-слоевого осаждения (АСО, ALD – atomic layer deposition). Задача воспроизводимого получения тонких и сверхтонких покрытий высокой степени конформности с прецизионным контролем их толщины и химического состава потребовала развития новых представлений о твердом веществе и химии его поверхности. Сутью нового метода явилась реализация на поверхности твердого тела химических реакций между подводимыми газообразными реагентами и функциональными группами подложки в условиях максимального удаления от равновесия. В частности, получение пленок диоксида титана, которое в ходе ХОГФ-процесса может быть представлено в брутто-виде как реакция гидролиза тетрахлорида титана $TiCl_4 + 2H_2O \rightarrow TiO_2 + 4HCl\uparrow$, при АСО реализуется как серия циклически чередующихся, разделенных во времени, самоограничивающихся поверхностных реакций:



где \equiv - это подложка.

Каждая реакция (1) и (2) называется полуциклом, а вместе они составляют полный реакционный цикл АСО. Повторение циклов заданное число раз приводит к формированию химически связанного с подложкой слоя высокой степени равномерности и конформности, с отсутствием пустот и относительно малым количеством дефектов. Контроль толщины происходит на молекулярном уровне, т.к. каждый реакционный цикл добавляет строго определенное количество материала на поверхность, называемое постоянной роста.

Возможности метода АСО и его преимущества по сравнению с другими методами привели с начала XXI в. к большому количеству научно-практических работ, связанных с поиском новых летучих реагентов, способов их синтеза и очистки, разработкой новых АСО-процессов и оборудования для их проведения и мониторинга. Исследуются механизмы поверхностных реакций, свойства получаемых покрытий и характеристики сложных наноструктур, изготавливаемых на их основе. Круг тонкопленочных материалов, полученных методом АСО, постоянно расширяется. Разрабатываются маршруты, обеспечивающие получение многокомпонентных материалов. Посредством АСО был реализован целый ряд практически важных задач

микроэлектроники. Можно отметить такие применения как “high-k”-диэлектрик в затворах КМОП-транзисторов, в устройствах динамической памяти с произвольным доступом (DRAM), flash-, резистивной и сегнетоэлектрической памяти. Разработаны варианты осаждения проводящих слоев для изготовления затворов, контактов и межсоединений (металлы, нитриды металлов). Применение метода АСО нашлось при изготовлении различных приложений микросистемной техники, солнечной энергетики, оптики, катализа, медицины, бытовых защитных и декоративных покрытий и др.

Нельзя также обойти вниманием развитие двух таких производных классического метода АСО как селективное АСО (area-selective ALD) и атомно-слоевое травление (ALEt – atomic layer etching). В первом случае используется отличие в скорости инициации поверхностных реакций на подложках различного типа, что позволяет уменьшить проблемы, связанные с последовательным совмещением масок на литографических операциях. Во втором случае попеременная подача соответствующих реагентов приводит не к росту, а к контролируемому удалению субмонослоя твердой фазы. Оба варианта тоже активно развиваются, используются, в том числе совместно и находят все большее практическое применение в технологиях конструирования наноструктур.

Вязкость щелочноборатных расплавов $\text{Na}_2\text{O}-\text{B}_2\text{O}_3$ в зависимости от состава

Самойлова Мария Алексеевна

Рябов Валерий Васильевич

¹*Институт металлургии УрО РАН*

Хохряков Александр Александрович, д.х.н.

mari.makarenko.1993@mail.ru

Измерена вязкость бинарного расплава $\text{Na}_2\text{O}-\text{B}_2\text{O}_3$ вибрационным методом в интервале $T = 900-1600\text{K}$ и концентраций 0-38 мол.% оксида натрия и представлена на рис.1. Из рис. 1 удается выделить максимумы при 6,7; 15,4; 28 мол.% Na_2O , появление которых связано с изменением взаимодействия между надструктурными единицами расплава, формирующих структуру среднего порядка. [1]

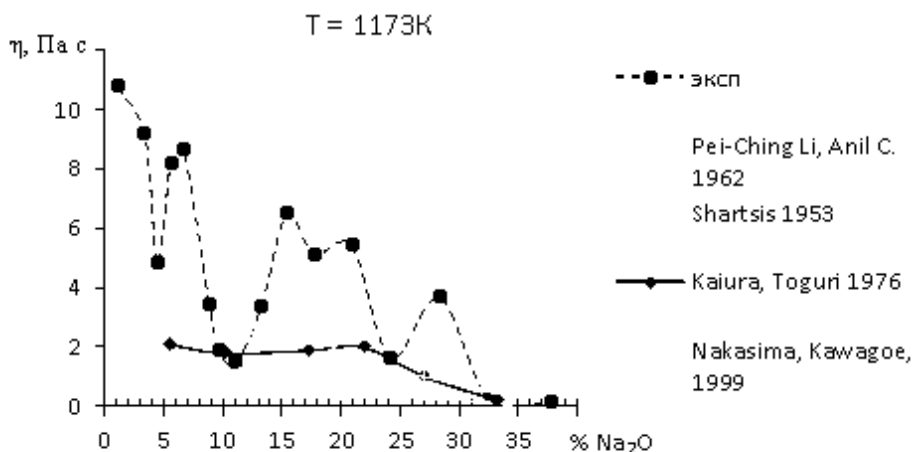


рис.1 Вязкость натриевоборатных расплавов от состава

Из рис.1 видно, что вязкость расплавов, измеренная вибрационным методом, сильно отличается от вязкости, измеренной методом вращающихся цилиндров. Это обусловлено разными напряжениями, действующими на расплав, что приводит к различным особенностям вязкого течения расплавов. Удобным параметром, характеризующим течение расплавов, под действием напряжения, является число Рейнольдса (Re).

Зависимость вязкости от числа Рейнольдса (Re) для разных методов показана на рис. 2 Из рис. видно, что с увеличением числа Рейнольдса, ламинарность вязкого течения расплавов нарушается. Это приводит к увеличению значений вязкости.

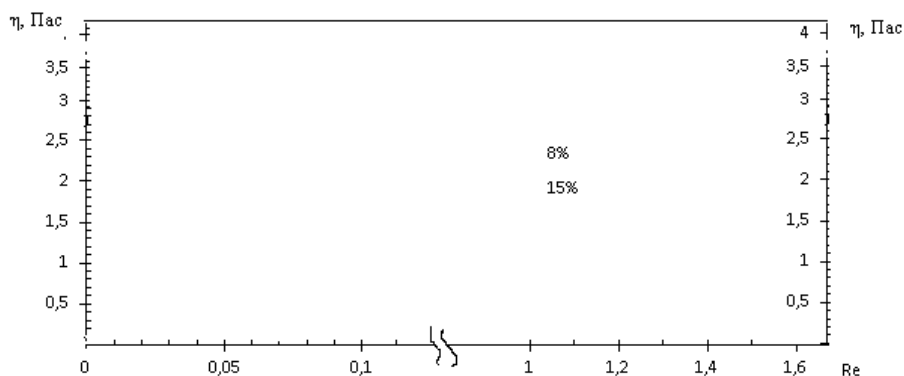


рис 2. Зависимость η (Па·с) от числа Рейнольдса (Re) для систем $xNa_2O-(100-x)B_2O_3$:
 \blacktriangle 8, \bullet 15 мол.% Na_2O

Список публикаций:

[1] С. Ю. Мельчаков, А. А. Хохряков, М. А. Самойлова, В. В. Рябов, Д. А. // 2022. ФХС. Т.48. №3. С. 253-261.

Релаксационная поляризация в органических пленках

Чечина Мария Сергеевна

Южный федеральный университет

Сидоренко Евгений Никифорович, к.ф.-м.н.

mchechina@sfedu.ru

Органическая электроника – новая область науки, которая за последние десятилетия достигла огромных успехов. Органические материалы обладают уникальными свойствами, такими как высокая чувствительность, биосовместимость и гибкость. Уже широко применяются легкие, гибкие и относительно дешевые солнечные элементы. Разработаны печатные органические транзисторы, интегральные схемы и сенсоры на их основе, органические светоизлучающие диоды (OLED), которые широко используются в мобильных телефонах и телевизорах. В настоящее время ведутся разработки новых органических материалов и исследуются их физико-химические характеристики с целью создания новых более совершенных устройств.

В данной работе изучена релаксационная поляризация органических пленок двух типов, полученных на поверхности прокатной малоуглеродистой стали методом адсорбции различных видов органических соединений из 1М раствора H_2SO_4 . Пленки типа А получены при использовании в качестве органического ингибитора поверхностно-активного вещества (ПАВ) класса имидазола. Пленки типа В образованы при адсорбции органического ингибитора на основе производного гидробромида бензимидазола ПАВ·НВг. Концентрация ингибиторов выбрана равной 10^{-3} моль/л. Время формирования пленок 1 сутки.

Установлено, что при введении в раствор кислоты ингибитора В типа защитные свойства пленок возрастают в несколько раз по сравнению со свойствами пленок А типа. Действительные части комплексной электроемкости всех полученных пленок отрицательны, а их величины в значительной степени зависят от частоты, что типично для ранее исследованных аналогичных антикоррозионных пленок [1] (рис.1 а).

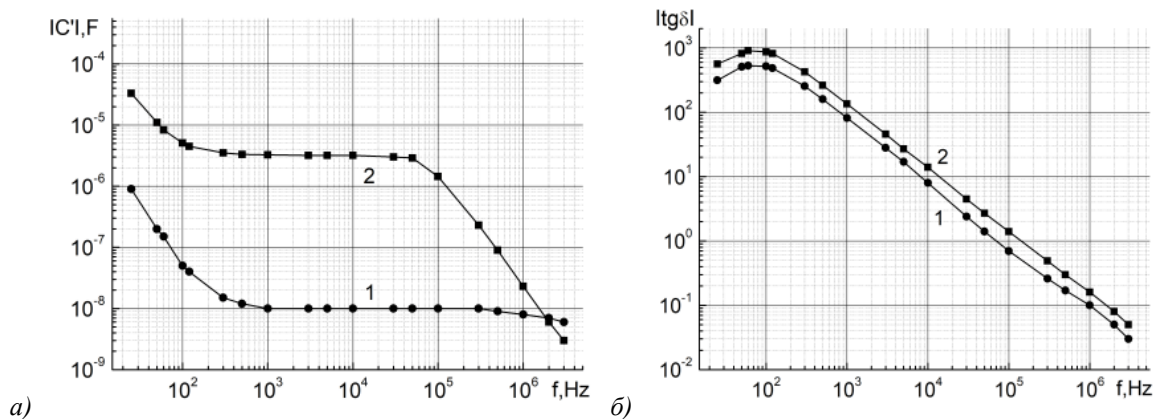


рис.1. Частотные зависимости модуля действительной части комплексной электроемкости (а) и модуля тангенса угла диэлектрических потерь (б) для пленок типа А (1) и типа В (2).

Известны несколько механизмов, объясняющих частотную зависимость и отрицательность электроемкости различных материалов. Для исследуемых органических пленок наиболее вероятной причиной может быть развитая релаксационная поляризация с инверсной напряженностью электрического поля [2]. Видно, что релаксационные процессы сильнее развиты в пленках типа В: с уменьшением частоты в диапазоне ($3 \cdot 10^6 - 3 \cdot 10^4$) Гц электроемкость пленок возрастает более чем на два порядка. Характерная особенность релаксационных процессов этого типа – это отсутствие максимума в частотной зависимости модуля тангенса угла диэлектрических потерь. Действительно, на рис 2б в указанном диапазоне частот наблюдается только монотонный рост $|\operatorname{tg}\delta|$ с уменьшением частоты.

Для материалов с высокой проводимостью в значение $\operatorname{tg}\delta$ существенный вклад вносит механизм сквозной электропроводности. Его присутствие в исследуемых пленках подтверждает наличие в частотных зависимостях $|\operatorname{tg}\delta|$ максимума в области более низких частот (10^2 Гц) для пленок двух типов (рис.1б). Причем, большей сквозной электропроводностью обладают пленки А типа.

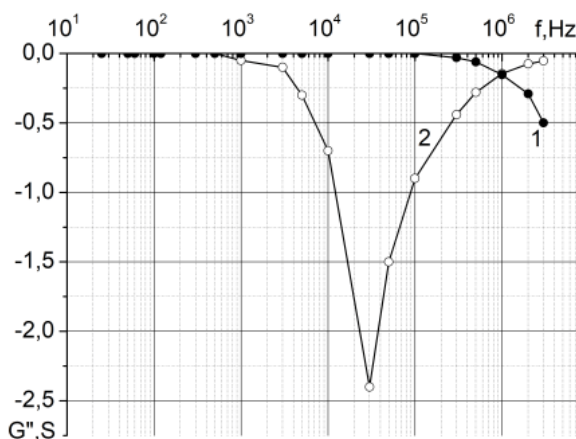


рис.2. Частотные зависимости мнимой части комплексной электропроводности (1) – пленок А типа и (2) – пленок В типа.

Еще одним признаком существования в пленках релаксационной поляризации с инверсной напряженностью электрического поля является наличие максимума в частотной зависимости мнимой части комплексной электропроводности. Наибольший максимум при более низких частотах наблюдается в зависимостях $G''(f)$ для пленок типа В (рис.2)

Таким образом, в ходе проведенного эксперимента установлено, что в пленках, состоящих из молекул органической соли ПАВ·НВг, которые обладают высокой степенью защиты стали от коррозии, сильно развиты процессы релаксационной поляризации с инверсной напряженностью электрического поля.

Список публикаций:

[1] Shpanko S.P., Sidorenko E.N., Kuznetsova L.E., Sosin E.A // Springer Proceedings in Physics. 2019. Vol. 224, P. 123-130

[2] Bogatin A.S., Sidorenko E. N., Shpanko S.P., Kovrigina S.A., Abdulvakhidov K.G., Nosatshev I.O.// Springer Proceedings in Materials. 2021. V. 10, pp. 223-232

Влияние давления на электрические характеристики органических пленок

Чечина Мария Сергеевна

Южный федеральный университет

Шпанько Светлана Павловна, к.х.н.

mchechina@sfedu.ru

Защита стальных изделий от коррозионного разрушения является актуальной задачей современного промышленного производства. Среди существующих способов защиты важную роль играет метод нанесения на поверхность стальных изделий пленок органических ингибиторов, модификация которых неорганическими компонентами значительно увеличивает ингибирующие свойства органических соединений.

Метод ингибирования отличается высокой эффективностью, универсальностью и экономической целесообразностью. Важное значение имеет длительность сохранения защитных свойств адсорбционных пленок ингибиторов, так как при эксплуатации конструкции подвергаются воздействию различных внешних факторов таких, как влажность, температура, давление.

Цель данной работы – исследовать влияние одноосного давления на электрические характеристики адсорбционных антикоррозионных органических пленок на поверхности стальных образцов.

Получены два типа пленок с ингибиторами различного вида. Для пленок первого типа в качестве ингибитора коррозии низколегированной стали в 1М растворе H_2SO_4 использовали органическое основание класса имидазола – ПАВ (ПАВ – поверхностное активное вещество), при получении пленок второго типа органическую соль - гидробромид бензимидазола ПАВ·HBr. Концентрация ингибиторов 10^{-3} моль/л. Время формирования пленок 1 сутки.

Установлено, что исследуемые соединения являются ингибиторами адсорбционного типа. Причем, степень экранирования θ_2 поверхности стали ингибитором второго типа вчетверо больше θ_1 . К количественным показателям ингибиторной защиты относятся так же коэффициент торможения коррозии K и степень защиты Z . Расчеты, выполненные по результатам эксперимента, показали, что K_2 больше K_1 в два раза, а степень защиты составляет, соответственно $Z_2 = 90\%$ и $Z_1 = 80\%$.

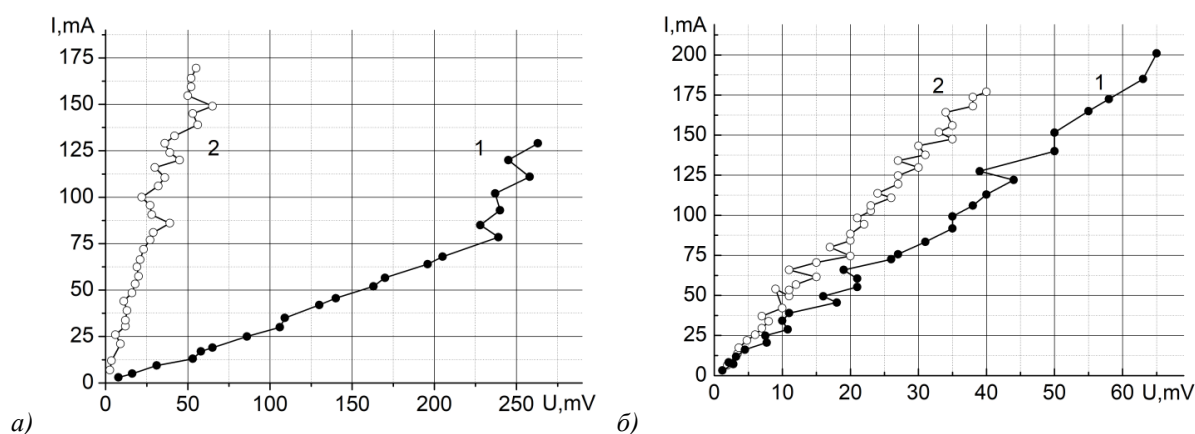


рис.1. Вольт-амперные характеристики пленок ПАВ (1-а) и ПАВ·HBr (1-б) при различных одноосных давлениях: 1 - 10^4 Па и 2 - $1,5 \cdot 10^5$ Па.

Измерения вольт-амперных характеристик (ВАХ) пленок показали (рис.1.), что зависимости $u=f(I)$ близки к линейным. Но на них наблюдаются многочисленные скачкообразные участки S-образного типа, свидетельствующие о наличии отрицательных дифференциальных сопротивлений. Известно, что такие ВАХ характерны для органических материалов с прыжковым механизмом переноса заряда [1]. Среднее значение статического сопротивления ($R_{ст}$) пленки первого типа с ростом давления от 10^4 Па до $1,5 \cdot 10^5$ Па уменьшается от 3 до 0,4 Ом, а $R_{ст}$ пленки второго типа менее чувствительно к давлению и уменьшается только на 65%.

Прыжковый тип проводимости обусловлен наличием ловушек в пленках, на которых могут сначала накапливаться, а затем освобождаться заряды, вызывая «микроразряды». Этот процесс сопровождается возникновением разности фаз между током и напряжением, что отражается на электроемкости пленок.

Действительно, все измеренные нами с помощью измерителя иммитанса Е7-30 значения электроемкостей пленок на разных частотах указывают на индуктивный характер импеданса. Давление существенно изменяет частотную зависимость емкости (рис.2). В низкочастотной области до частот 10^5 Гц емкость увеличивается, а в высокочастотной уменьшается.

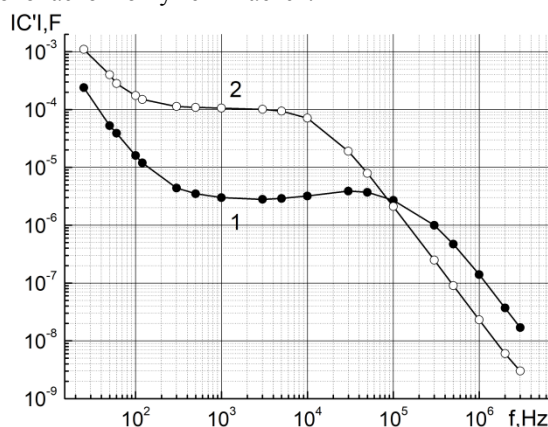


рис.2. Частотные зависимости модуля действительной части комплексной электроемкости пленок ПАВ при различных одноосных давлениях: 1 - 10^4 Па и 2 - $1,5 \cdot 10^5$ Па.

Пленки, полученные методом ингибирования не относятся к тонким [2] и имеют возможность деформироваться под действием давления.

Таким образом, более высокое значение статического сопротивления пленок 1 типа и более сильная зависимость их $R_{ст}$ от давления указывают на менее совершенные и вероятно более рыхлые пленки, существенно деформирующиеся при механическом напряжении, и хуже защищающее сталь от коррозии

Список публикаций:

[1] Шпанко С.П., Сидоренко Е.Н., Семенчев А.Ф., Лянгузов Н.В., Анисимова В.А.// *Физикохимия поверхности и защита материалов*. 2017. Т.53. №2. С.210-217.

[2] Sidorenko E. N., Shpanko S.P., Bunin M.A.// *Springer Proceedings in Materials*. 2023. V. 10, 1st ed. P. 232-240. ISBN978-3-031-21572-8

Влияние площади поверхности и структуры слоя биомассы на характеристики микроволнового пиролиза

Швец Анатолий Сергеевич

Няшина Галина Сергеевна, Виноградский Кирилл Владимирович

Национальный исследовательский Томский политехнический университет

Стрижак Павел Александрович

ass74@tpu.ru

Быстрый темп роста промышленности и технологий с каждым годом требует все большее количество энергии [1]. Согласно прогнозам развития мировой энергетики и энергетических технологий [2, 3] годовое потребление энергии к 2050 году составит 1000–1500 ЭДж энергии в год по сравнению с нынешними 500. В настоящее время более 85 % мирового потребления энергии обеспечивается за счет традиционных видов топлива [4]. Ограниченность запасов невозобновляемых ресурсов, а также изменение климата, вызванное выбросами парниковых газов, требуют перехода на более сложное био-возобновляемое сырье [5]. В связи с этим растущий интерес во всем мире вызывают возобновляемые источники энергии, такие как солнечная энергия, ветряная энергия, приливы, биомасса [1 - 6]. В то время, как первые три ресурса используются только для получения энергии, биомасса имеет более широкое применение и помимо получения энергии может использоваться также для производства химикатов и материалов [6].

В настоящее время мировое научное сообщество уделяет много внимания различным направлениям в изучении микроволнового и термохимического пиролизом: влияние характеристик топлива (размер частиц, расположение в тигле, плотность слоя, влажность) [7 - 9], характеристик нагрева (мощность, температура) [9-11], способов предварительной обработки топлива [7], совместного сжигания биомассы с другими видами отходов и топлива [12] на эффективность пиролиза, выход и распределение продуктов (твердых, жидких и газообразных), их состав, выбросы. Перечисленные выше исследования в области микроволнового пиролиза иллюстрируют активное развитие данного направления. При этом сам процесс пиролиза, его характеристики, разработка оптимальных методик проведения исследований пиролиза биомассы, направленных на увеличение выхода продуктов (в частности, генераторного газа), продолжают требовать более глубокого изучения. Цель настоящего исследования состояла в изучении влияния площади поверхности и структуры слоя биомассы, расположения и дисперсности на характеристики микроволнового пиролиза.

В экспериментах с варьированием расположения биомассы в тигле, согласно полученным данным, установлено, что средние концентрации СО при распределении образца на половине тигля увеличиваются почти в 2 раза по сравнению с распределением по краям тигля, и в 1.5 раза по сравнению с распределением образца по всей поверхности тигля. Расположение топлива на половине тигля позволило биомассе прореагировать полностью, о чем говорит наименьший оставшийся зольный остаток 3.4 % по сравнению с расположением биомассы по краям – 4.2 % и по всей поверхности – 4.5 %. Причиной отличия концентрации газов можно считать площадь контакта биомассы с поверхностью тигля. При расположении образца по краям фрагментами биомасса прогревается отдельными элементами, получая тепловую энергию от микроволнового излучения и стенок тигля. Первыми начинают прогреваться фрагменты расположенные со стороны магнетрона, далее – остальные. Топливо прогорает не равномерно в связи с отсутствием теплообмена между частицами биомассы и имеет минимальные значения концентраций СО, СО₂, NO и СН₄. При расположении образца биомассы по всей поверхности тигля, концентрации СО₂ и Н₂ являются максимальными. Топливо получает тепловую энергию от микроволнового излучения, стенок тигля, а также происходит передача тепла между частицами биомассы. Образец как и во всех случаях начинает прогорать со стороны магнетрона. Топливо прореагировало не полностью, что связано с тем, что большая поверхность требует большего количества входящей энергии и равномерного нагрева.

Установлено, что создание на поверхности биомассы искусственных пор позволяет увеличить выход монооксида углерода на 18 и 32 % по сравнению с искусственными каналами и ровным слоем, соответственно. При этом выход H_2 больше на 33 % по сравнению с ровным слоем, и на 3 % меньше по сравнению с искусственными каналами. Выход CO_2 увеличился на 23 %, выделение CH_4 больше в 2 раза по сравнению с ровным слоем. Увеличение концентрации H_2 , CO , CO_2 при создании пор может свидетельствовать о том, что слой реагировал лучше, пиролиз протекал интенсивнее. О чем говорит наименьший зольный остаток 1.6 % по сравнению с ровным слоем 3.5 %. Выделение концентраций газов в экспериментах с измененной структурой биомассы в 2 раза меньше по сравнению с ровной поверхностью. Создание большого количества отверстий на поверхности облегчает диффузию пиролизующего агента в слой навески, что интенсифицирует процессы разложения и выделение газообразных продуктов пиролиза.

Установлено, что пиролиз более мелких по размеру частиц пиролиз более мелких по размеру частиц (140 и 250 мкм) характеризуется более высокими концентрациями CO , CO_2 , CH_4 , H_2 , H_2S , SO_2 , NO по сравнению с пиролизом частиц размером 2000 мкм. Выход CO при пиролизе опилок с размерами частиц 140 мкм увеличился на 42 и 11 % по сравнению с опилками размером 250 и 2000 мкм, соответственно. Аналогичное сравнение проведено для других газов: выход CO_2 уменьшился на 15 и 1.5 %, выход CH_4 увеличился на 30 и 60 %, выход H_2 увеличился на 1.5 и 43 %. Если брать во внимание максимальные значения выхода компонентов генераторного газа, то можно сказать, что выход CH_4 и H_2 для размера частиц 140 мкм увеличился в 3 и 1.5 раза, соответственно, по сравнению с выходом данных газов для частиц размером 2000 мкм. Для размера 250 мкм зарегистрированы минимальные значения CO и NO 10.2% и 0.08 ppm соответственно. Анализируя количество зольного остатка, можно утверждать, что при пиролизе частиц более мелкого размера уменьшается количество твердого остатка, при этом количество газа должно возрастать.

Меньший размер частиц имеет большую площадь контакта, что приводит к более высоким скоростям химических реакций. При более крупном размере частицы увеличивается градиент температуры внутри нее. В один и тот же момент времени внутри частицы температура ниже, чем на ее поверхности.

Список публикаций:

1. N. Gao, M. Śliz, C. Quan, A. Bieniek, A. Magdziarz, *Biomass CO₂ gasification with CaO looping for syngas production in a fixed-bed reactor*, *Renew. Energy* 167 (2021) 652–661
2. European Commission, *World Energy Outlook – 2050 – WETO H2, 2007*
3. International Energy Agency, *World Energy Outlook, 2021*
4. P. Weiland, *Biogas production: current state and perspectives* *Appl. Microbiol. Biotechnol.* 85 (2010) 849–860
5. W. Marquardt, A. Harwardt, M. Hechinger, K. Kraemer, J. Viell, A. Voll, *The biorenewables opportunity – toward next generation process and product systems*, *AIChE J.* 56 (2010) 2228–2235
6. S. Shao, C. Liu, X. Xiang, X. Li, H. Zhang, R. Xiao, Y. Cai, *In situ catalytic fast pyrolysis over CeO₂ catalyst: Impact of biomass source, pyrolysis temperature and metal ion*, *Renew. Energy* 177 (2021) 1372–1381
7. Y.-F. Huang, W.-H. Kuan, C.-Y. Chang, *Effects of particle size, pretreatment, and catalysis on microwave pyrolysis of corn stover*, *Energy* 143 (2018) 696–703
8. J. Lin, C. Cui, S. Sun, D. Xu, R. Ma, M. Wang, L. Fang, B. Dong, *Enhanced combined H₂O/CO₂ reforming of sludge to produce high-quality syngas via spiral continuous microwave pyrolysis technology: CO₂ reforming mechanism and H₂/CO directional regulation*, *Chem. Eng. J.* 434 (2022) 134628
9. J. Li, H. Liu, L. Jiao, B. Yan, Z. Li, X. Dong, G. Chen, *Microwave pyrolysis of herb residue for syngas production with in-situ tar elimination and nitrous oxides controlling*, *Fuel Process. Technol.* 221 (2021) 106955
10. R. Zhang, L. Li, D. Tong, C. Hu, *Microwave-enhanced pyrolysis of natural algae from water blooms*, *Bioresour. Technol.* 212 (2016) 311–317
11. J. Li, L. Jiao, J. Tao, G. Chen, J. Hu, B. Yan, M. Mansour, Y. Guo, P. Ye, Z. Ding, T. Yu, *Can microwave treat biomass tar? A comprehensive study based on experimental and net energy analysis*, *Appl. Energy* 272 (2020) 115194
12. F. Mushtaq, R. Mat, F. N. Ani, *A review on microwave assisted pyrolysis of coal and biomass for fuel production*, *Renewable Sustainable Energy Rev.* 39 (2014) 555–574
13. C. Chen, D. Huang, X. Bu, Y. Huang, J. Tang, C. Guo, S. Yang, H. Huang, *Microwave-assisted catalytic pyrolysis of Dunaliella salina using different compound additives*, *Renew. Energy* 149 (2020) 806–815
14. P. Leskinen, M. Lindner, P.J. Verkerk, G.J. Nabuurs, J. Van Brusselen, E. Kulikova, M. Hassegawa, B. Lerink, *Russian forests and climate change, What Science Can Tell Us 11*, *European Forest Institute* (2020) 1–140
15. L. Li, Y. Tan, J. Sun, Y. Zhang, L. Zhang, Y. Deng, D. Cai, Z. Song, G. Zou, Y. Bai, *Characteristics and kinetic analysis of pyrolysis of forestry waste promoted by microwave-metal interaction*, *Energy* 232 (2021) 121095

Кристаллическое строение комплексов Cu(II) и Co(II) с n -{2-[(ϵ)-(4-циклогексилфенил)иминометил]фенил}-4-метилбензен-1-сульфонамидом

Ширяева Анастасия Андреевна

Власенко Валерий Григорьевич, Бурлов Анатолий Сергеевич

Южный федеральный университет

Власенко Валерий Григорьевич, д.ф.-м.н.

Anastasia.shiryaeva00@mail.ru

Азотетинные соединения (основания Шиффа) образуют многочисленный класс органических соединений, которые широко используются в качестве лигандов при получении комплексов металлов. Такие комплексы имеют большое структурное разнообразие, благодаря множеству способов связывания металлических центров модифицированными азотетинными лигандами, являясь, таким образом, одним из наиболее значимых стереохимических модельных соединений химии переходных металлов с широким спектром практических приложений. Азотетинные металлокомплексы, особенно с би- и полиядерной структурой, также обладают рядом интересных магнитных свойств и могут быть потенциально применимы в спинтронике и для создания молекулярных магнетиков. В настоящей работе синтезированы и структурно охарактеризованы спектроскопическими методами и РСА новый азотетин N -{2-[(ϵ)-(4-циклогексилфенил)иминометил]фенил}-4-метилбензен-1-сульфонамид (**1**) и комплексы Cu(II) (**2a**) и Co(II) (**2b**) на его основе. Синтез комплексов Cu(II) и Co(II) **2a,b** проводили кипячением метанольных растворов **1** и моногидрата ацетата меди или тетрагидрата ацетата кобальта в мольном соотношении 2:1 (схема).

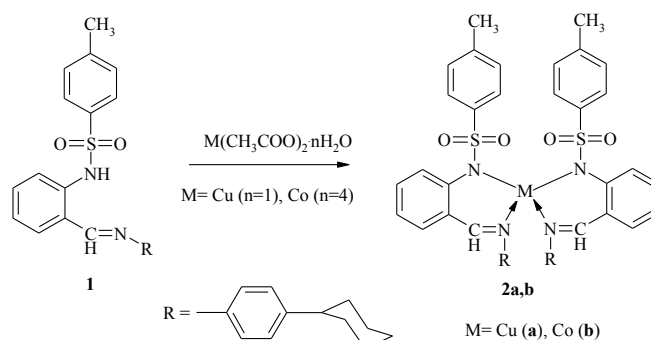


схема. Синтез комплексов **2a,b**

Кристаллическое строение **1** и комплексов **2a,b** установлено методом рентгеновской дифракции монокристаллов. Монокристалл **1** состоит из двух кристаллографически независимых молекул (рис. 1), геометрические параметры которых находятся в типичных диапазонах, наблюдаемых для других лигандов оснований Шиффа с тозиламиновыми фрагментами [1, 2].

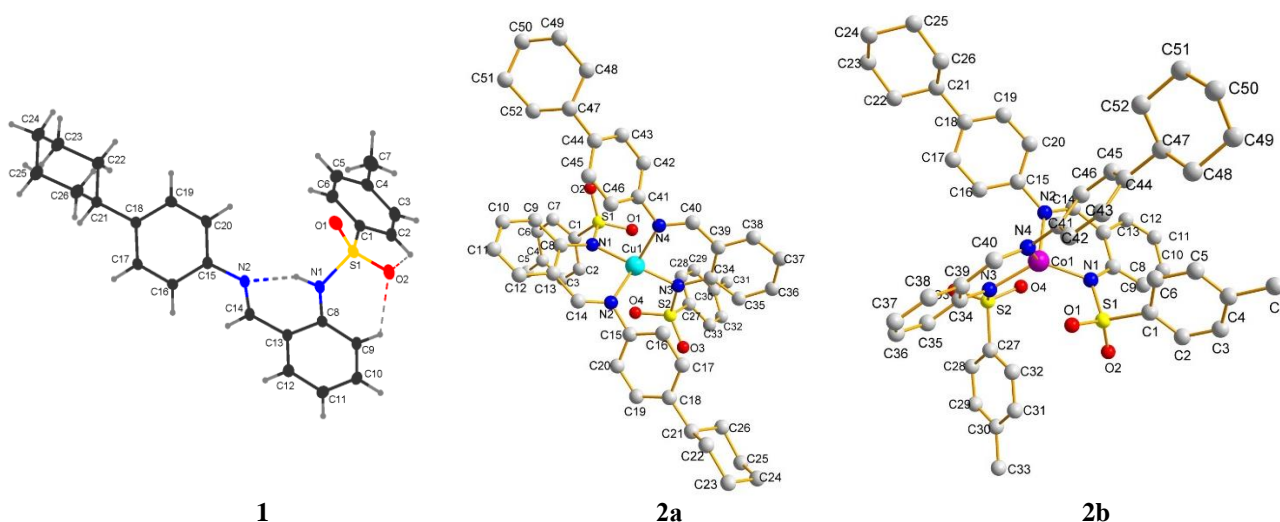


рис. 1 Структура молекул **1** и комплексов **2a** и **2b** (атомы водорода не показаны)

Каждый иминометилфенильный фрагмент плоский (среднеквадратичное отклонение подобранных атомов находится в диапазоне 0,019-0,020). Углы между бензольным и иминометилфенильным фрагментами

близки к ортогональным ($77,52(4)^\circ$ и $79,45(4)^\circ$ для 1). В 1 углы между иминометилфенильным и фенильным фрагментами заметно различаются, $4,64(10)^\circ$ и $23,97(8)^\circ$, разница в углах между фенильным фрагментом и плоскостью, проведенной через атомы циклогексильного звена, не столь значительна ($38,53(8)^\circ$ и $51,29(7)^\circ$). Молекулярная структура каждого лиганда усилена сильными связями N–H...N и более слабыми связями C–H...O=S. В кристаллах слабые межмолекулярные связи C–H...O и C–H...л соединяют соседние молекулы.

Комплексы 2a и 2b представляют собой бисхелаты, в которых две молекулы 1 координированы к центральному атому меди или кобальта хелатно и выступают в качестве N,N-бидентатных лигандов. Центральный атом металла находится в искажённом тетраэдрическом окружении четырёх атомов азота. В структуре реализуются два шестичленных металлоцикла, имеющих конформацию конверта.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности 2023 г. №FENW-2023-0014).

Список публикаций:

[1] Vlasenko V.G., Burlov A.S., Koshchienko Y.V., Kiskin M.A., Garnovskii D.A., Zubavichus Y.V., Kolodina A.A., Trigub A.L., Zubenko A.A., Drobin Y.D. *Inorg. Chim. Acta*, 2020, 510, 119776.

[2] Vlasenko V.G., Burlov A.S., Koshchienko Y.V., Kolodina A.A., Kubrin S.P., Chaltsev B.V., Zubavichus Y.V., Lazarenko V.A., Zubenko A.A., Klimenko A.I. *J. Mol. Struct.*, 2022, 1247, 131370.

11 - Астрофизика, физика космоса, современные и перспективные космические исследования и технологии

Фитагдинов Роберт Равильевич, 5 курс

Москва, Московский физико-технический институт (МФТИ), физтех-школа физики и исследований им. Ландау
Генерация показаний наземного детектора эксперимента Telescope array и поиск аномалий с помощью нейронных сетей

Харук Иван Вячеславович, к.ф.-м.н.

e-mail: robertfitagdinov@gmail.com

стр. 161

Генерация показаний наземного детектора эксперимента Telescope array и поиск аномалий с помощью нейронных сетей

Фитагдинов Роберт Равильевич

*Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)*

Институт ядерных исследований РАН

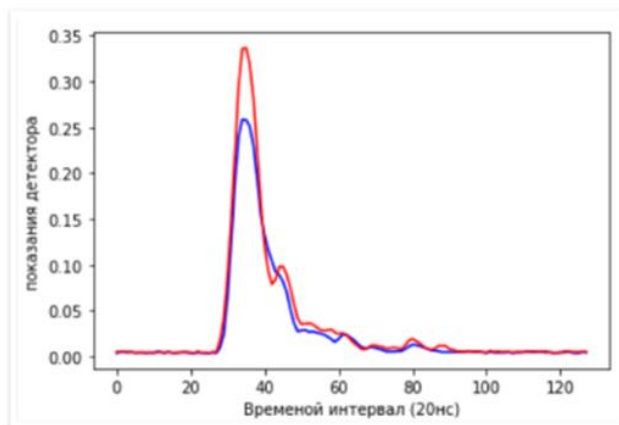
robertfitagdinov@gmail.com

Основной целью данной работы было разработать модели для генерации показаний поверхностного детектора с наибольшей амплитудой для эксперимента Telescope Array с помощью нейронных сетей. Данные, используемые для обучения модели, были получены с помощью метода Монте-Карло. Для достижения данной цели были написаны генеративно состязательные сети Васерштейна с градиентным штрафом.

Были получены визуально похожие данные. Была написана функция поиска аномалий, которая позволила не только искать расхождения реальных и смоделированных данных, но и воспроизводить данные близкие к заданным. Задачами дальнейших исследований могут стать написание генеративно состязательной сети для всех поверхностных детекторов, а не только для детектора с наибольшей амплитудой сигнала. Таким образом эта модель может быть хорошей альтернативой методу Монте-Карло, который сейчас применяется. Ее преимуществом перед ним может служить скорость, которая отличается на несколько порядков.

Обсерватория эксперимента Telescope Array включает в себя 507 сцинтилляционных поверхностных детекторов. Они занимают площадь около 700 квадратных километров. Каждый детектор содержит два слоя сцинтиллятора толщиной 1,2 сантиметра

Данные, используемые в работе, получены были методом Монте Карло. В данной работе мы построили генеративно-состязательную нейронную сеть для генерации показаний наиболее активного детектора. Данные имели размер (472351,128,2) где 2- отвечает за 2 слоя наземного детектора, 128 – количество бинов на которые разбит сигнал, продолжительностью 20 нс. Данные были отнормированы так, чтобы показания были в интервале от 0 до 1. Ниже представлен пример показания детектора. Синим и красным показаны показания 1 и 2 слоя детектора соответственно.



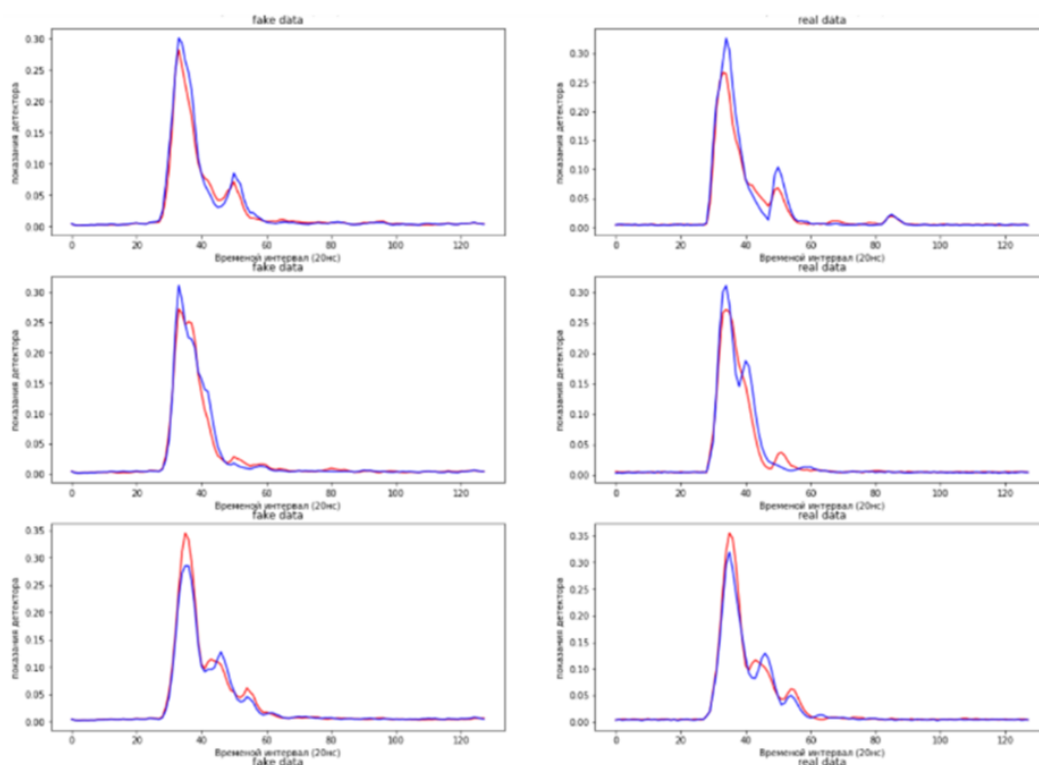
Для генерации данных использовались генеративно состязательные сети Васерштейна с градиентным штрафом. Сеть состоит из 2х нейронных сетей, называемыми генератором и критиком. Генератор принимает на

вход шум и производит из них реалистичные данные, а критик пытается сказать, насколько они похожи на реальные. Таким образом их обучение происходит посредством соперничества друг с другом. В качестве ошибки используется второе расстояние Васерштейна.

Критик состоит из 5 слоев сверточных 2х-мерных сетей с ядром (5,2). После каждого сверточного слоя идет слой MaxPooling обеспечивающий понижение размерности. Критик имеет 150 000 обучаемых параметров.

Генератор принимает на вход шум размером 200 из нормального распределения. Генератор состоит из 4 сверточных транспонированных сетей с ядром (5,2). Он имеет около 200 000 обучаемых параметров.

Пример сгенерированных и реальных данных можно видеть ниже. Слева представлены сгенерированные данные, справа – реальные



Для поиска аномалий был написан алгоритм, получающий на вход изображение и подбирающий шум для генератора посредством градиентного спуска для функции ошибки. Ошибка состояла из 2х частей:

- 1 Сначала рассчитывалась разница показаний реальных и сгенерированных данных. Позже подсчитывалась сумма всех элементов полученной матрицы.
- 2 Разница показаний дискриминатора для реальных и сгенерированных данных. Эта ошибка имела вес 0,001.

В связи с улучшением качества генерации данных, визуально стало тяжело различать качество моделей. В связи с этим была взята в качестве меры ошибка, описанная выше. Таким образом наиболее лучшая модель имела наименьшую меру т.е. выдавала наиболее реалистичные данные. Благодаря этому способу появилась возможность не только визуально, но и качественно оценивать модели.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда 22-22-20063.

Список публикаций:

1. Sofia Vallecorsa, Federico Carminati, and Gulrukh Khattak - "3D convolutional GAN for fast simulation"
2. Martin Arjovsky, Soumith Chintala, Léon Bottou - "Wasserstein GAN"
3. Ishaan Gulrajani, Faruk Ahmed, Martin Arjovsky, Vincent Dumoulin, Aaron Courville - "Improved Training of Wasserstein GANs"
4. O. Kalashev, I. Kharuk, M. Kuznetsov, G. Rubtsov, T. Sako, Y. Tsunesada, Ya. Zhezher - "Identifying mass composition of ultra high energy cosmic rays using deep learning"
5. R. U. Abbasi, M. Abe, T. Abu-Zayyad, M. Allen ... - "Mass composition of ultrahigh-energy cosmic rays with the Telescope Array Surface Detector data"
6. R. U. Abbasi, M. Abe, T. Abu-Zayyad, M. Allen ... - "Constraints on the diffuse photon flux with energies above 1018 eV using the surface detector of the Telescope Array experiment"
7. Ian J. Goodfellow, Jean Pouget-Abadie, Mehdi Mirza, Bing Xu, David WardeFarley, Sherjil Ozair, Aaron Courville, Yoshua Bengio - "Generative Adversarial Networks"

11 - Биофизика, медицинская физика

Абдрахимов Салават Айдарович, магистрант 1 года обучения
Уфа, Уфимский университет науки и технологий, физико-технический институт
Краткий обзор работ по проводимости молекул ДНК
Шарипов Талгат ишмухамедович, к.ф.-м.н.
e-mail: salavat907abdr@gmail.com стр. 165

Вахрушева Елизавета Павловна, 4курс
Томск, Томский государственный университет, физический
Неинвазивная оценка фракционного резерва кровотока на основе данных мультиспиральной компьютерной томографии
Суюндукова Алмагуль Туктаровна
e-mail: lizastepanova52@gmail.com стр. 166

Закирьянов Фарит Кабирович, доцент
Уфа, Уфимский университет науки и технологий, физико-технический институт
Комбинированная модель динамики ДНК
e-mail: farni@rambler.ru стр. 167

Кудояров Данил Шамилевич, аспирант 2 года обучения
Уфа, Уфимский университет науки и технологий, физико-технический институт
Измерение вольт-амперных характеристик олигонуклеотидов с известной последовательностью звеньев
Шарипов Талгат Ишмухамедович, к.ф.-м.н.
e-mail: danilkud@mail.ru стр. 168

Лысенко Виктория Юрьевна, магистрант 2 года обучения
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
Локальная атомная структура ионов Zn^{2+} при взаимодействии $ZnCl_2$ низкой концентрации с лентгмюровским монослоем арахиновой кислоты: теоретический анализ спектров XANES
Яловега Галина Эдуардовна, д.ф.-м.н.
e-mail: viktoriya.250699@mail.ru стр. 170

Нечаев Александр Николаевич, аспирант 2 года обучения
Томск, Томский государственный университет, радиофизический
Моделирование процесса СВЧ отогрева глубокого обморожения
Дунаевский Григорий Ефимович, д.т.н.
e-mail: sasha8227039@gmail.com стр. 171

Низамиева Альбина Фаритовна, магистрант 1 года обучения
Казань, Казанский (Приволжский) федеральный университет, институт Физики
Изучение взаимодействия радиопротекторного ДНК-связывающегося белка Dsup с модельной ДНК методами малоуглового рассеяния и атомно-силовой микроскопии
Горшкова Юлия Евгеньевна, к.ф.-м.н.
e-mail: alb9061@yandex.ru стр. 172

Пронина Екатерина Вячеславовна, аспирант
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
Локальная атомная структура ионов Zn^{2+} в дополнительных центрах связывания молекулы гемоглобина: теоретический анализ спектров XANES
Яловега Галина Эдуардовна, д.ф.-м.н.
e-mail: ev_pronina_105@mail.ru стр. 174

Семенова Александра Алексеевна, 4 курс
Томск, Томский политехнический университет, инженерная школа ядерных технологий
Совместное воздействие урана-238 и биоактивных соединений на скорости процессов биолюминесцентной биферментной системы
Сачкова Анна Сергеевна, к.б.н.
e-mail: a.smnv296@gmail.com стр. 175

Смыгалина Полина Павловна, магистрант 2 года обучения
Томск, Томский государственный университет, радиофизический
Распределение СВЧ-поля в камере микроволнового отогрева, работающей на частоте ниже критической, при вариации размера конечности
Дунаевский Григорий Ефимович, д.т.н.
e-mail: psmygalina@gmail.com стр. 176

Суюндукова Алмагуль Туктаровна, аспирант 3 года обучения
Томск, Томский государственный университет, физический
Оценка гемодинамической значимости стенозов в бифуркациях коронарных сосудов
Демкин Владимир Петрович, д.ф.-м.н.
e-mail: almagul.suyundukova@mail.ru стр. 177

Юрченко Екатерина Алексеевна, 4 курс
Томск, Томский государственный университет, радиофизический
Разработка системы для диагностики гематом мозга
Торгаев Станислав Николаевич, к.ф.-м.н.
e-mail: kattifi@mail.ru стр. 178

Краткий обзор работ по проводимости молекул ДНК

Абдрахимов Салават Айдарович

Уфимский университет науки и технологий

Шарипов Талгат Ишмухамедович, к.ф.-м.н.

salavat907abdr@gmail.com

В следствие бурного развития нанотехнологий дезоксирибонуклеиновая кислота (ДНК) является важнейшим биополимером одной из ключевых функций которого заключается в сохранении и передаче наследственной информации при функционировании живых организмов, зачастую все чаще используется в качестве материала для создания наноразмерных устройств[1-3]. Особенные физико-химические свойства дезоксирибонуклеиновой кислоты, такие как: комплементарность цепочек, большая жесткость, высокая плотность заряда, - позволяют в свою очередь создавать наноструктуры, подводящие к решению задач не только в области биологии и молекулярной медицины, но и нанoeлектроники. В связи с этим немаловажный интерес представляет изучение проводимости молекул ДНК.

Применение молекулы ДНК в нанoeлектронике затруднено из-за низких проводящих свойств молекулы. Для того чтобы достичь лучших результатов проводимости молекулу ДНК необходимо металлизировать. Исследователями [4] рассматривался процесс металлизации на ДНК – фибриллах в сравнении с единичными молекулами ДНК с использованием кремневой подложки n-типа (рис.1). В результате было установлено, что повышение плотности заряда и увеличением мест посадки для серебра больше на поверхности ДНК-фибрилл зафиксированных на поверхности кремния p-типа по сравнению с единичной молекулой ДНК.

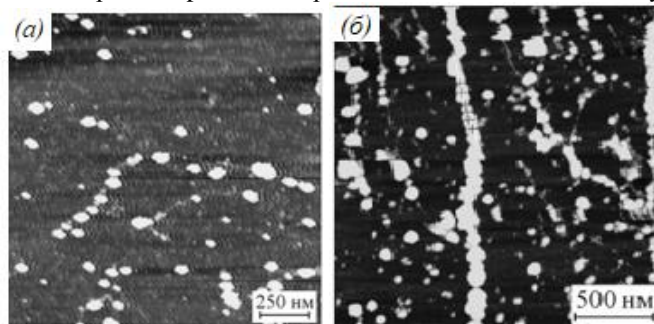


рис. 1. а) АСМ-изображение единичных молекул ДНК; б) АСМ-изображение молекул ДНК, собранных в фибриллы на поверхности кремния после процесса металлизации.

В работе [5] проводилось исследование процесса фиксации молекул ДНК для p и n типов подложек на поверхности монокристаллического кремния в зависимости от типа проводимости подложки.

Фиксация ДНК для p-типа подложки наблюдалась только при освещении капли раствора и только на специально не окисленной поверхности кремния p-типа при добавлении в раствор $MgCl_2$ (рис.2а) Также стоит отметить, что в проведенных исследованиях подложки были гладкими и не имели заметных дефектов.

Для подложек n-типа (рис.2б) представлены изображения специально неокисленных поверхностей кремниевых подложек n-типа, полученные после нанесения и выдержки капли раствора ДНК, содержащего $MgCl_2$, также при освещении. В данном варианте молекулы ДНК уже не могут закрепиться на поверхности. Присутствие ионов магния в растворе также не позволяло зафиксировать молекулы.

Как видно из рис.2б, наблюдается противоположность картине, приведенной на рис 2а. При сравнении видно, что на подложке n-типа не происходит фиксация молекулы ДНК.

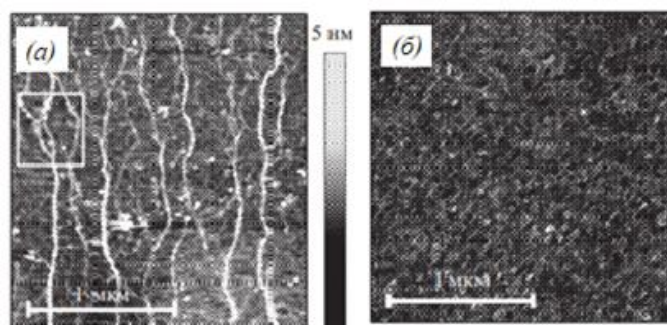


рис. 2. а) АСМ-изображение поверхности кремниевой подложки p-типа проводимости с зафиксированными на ней молекулами ДНК; б) АСМ-изображение подложки n-типа после нанесения раствора ДНК, содержащего $MgCl_2$, при освещении.

Стоит отметить, что в приведенных выше исследованиях фиксация молекул ДНК и дальнейшая проводимость была больше при использовании кремниевых подложек р-типа нежели n-типа. Проводимость молекул дезоксирибонуклеиновой кислоты (ДНК) имеет перспективы в наноэлектронике, молекулярной биологии и нанотехнологии.

Список публикаций:

[1] Seeman N.C. // *Current Opinion in Structural Biology*. 1996. № 4. P. 519-526.

[2] Goodman R.P., Schaap L.A.T., Tardin C.F. et al. // *Science*. 2005. № 5754. P. 1661-1665.

[3] Alivisatos P., Johnsson K. Peng X, et al. // *Nature*. 1996. № 382. P. 609-611.

[4] Пучкова А.О., Соколов П.А., Касьяненко Н.А. // *Журнал структурной химии*. Т. 52. № 6. С. 1231-1238.

[5] Волков И.Л., Базлов Н.В., Бондаренко А.С., Вывенко О.Ф., Касьяненко Н.А. // *Вестник Санкт-Петербургского университета. Серия 4. Физика. Химия*. 2009. № 3. С. 45-51.

Неинвазивная оценка фракционного резерва кровотока на основе данных мультиспиральной компьютерной томографии

Вахрушева Елизавета Павловна

*Суюндукова Алмагуль Туктаровна, Демкин Владимир Петрович, Мельничук Сергей Васильевич,
Завадовский Константин Валерьевич*

Национальный исследовательский Томский государственный университет

Суюндукова Алмагуль Туктаровна

Lizastepanova52@gmail.com

Коронарная недостаточность является причиной ишемической болезни сердца (ИБС) [1] и заключается в сниженной возможности притока крови, доставки кислорода и питательных веществ по коронарным артериям (КА) к миокарду. Дисбаланс между потребностью и доставкой приводит к нарушению перфузии миокарда и развитию метаболических нарушений, постепенно переходящих в функциональные, которые проявляются сначала диастолической, а затем и систолической дисфункцией. Причинами, ведущими к уменьшению или полному прекращению коронарного кровотока, могут быть функциональные состояния коронарных артерий, такие как: атеросклероз, тромбоз, спазм неизмененных или малоизменённых КА, нарушение микроциркуляции в миокарде, повышение активности свертывающей системы крови.

Степень сужения артерии, а также форма и расположение атеросклеротической бляшки могут влиять на ее гемодинамическую значимость, которая определяется фракционным резервом кровотока (FFR). При $FFR < 0.8$ стеноз считается гемодинамически значимым и указывает на ишемию [2]. К способам лечения ИБС относятся: медикаментозная терапия, аорто-коронарное шунтирование и стентирование КА. Последние два способа в сравнении с консервативной терапией приводят к более быстрому и радикальному восстановлению коронарного кровотока. В свою очередь стентирование в сравнении с коронарным шунтированием имеет важное преимущество, связанное с более низкой травматичностью вмешательства, что играет существенную роль в группе пациентов высокого хирургического риска. Однако возможности прямых измерений морфологических и гемодинамических параметров сосудов ограничены высокой стоимостью, необходимостью использования одноразовых проводников и рисками повреждения сосудистого русла, в то время как математическое моделирование коронарного кровотока на основе доступных экспериментальных данных позволяет обеспечить детальную информацию о состоянии сосудов. Успех численного эксперимента зависит от соответствия математической и вычислительной моделей реальным физическим процессам, протекающим в системе кровообращения человека. В общем случае гемодинамические процессы описываются трехмерными нестационарными уравнениями Навье-Стокса совместно с уравнениями динамики эластичных оболочек сосудов с учетом пространственной геометрии сосудов, физических свойств крови и вариации сердечной нагрузки. Решение таких многопараметрических задач связано с огромными вычислительными затратами, что требует применения высокопроизводительных систем и решения проблем, связанных с минимизацией ошибок метода вычисления. Поэтому наилучшее в практическом отношении качество или эффективность любой модели достигается как оптимальный компромисс между адекватностью модели к оригиналу и простотой, обеспечивающей необходимую точность и возможность ее использования по прямому назначению.

В работе предложен метод для вычисления коронарного кровотока и определения гемодинамической значимости стенозов с использованием 3D-геометрической модели коронарной артерии. Исследование включало в себя два этапа: первый этап – анализ данных, второй этап построение геометрии и выполнения численного моделирования. Анализ проводился для уже имевшихся данных КТ-ангиографии 3-х пациентов, которым выполнялось исследование на 64-срезовом мультиспиральном компьютерном томографе с последующим инвазивным измерением фракционного резерва кровотока. Численное моделирование кровотока в коронарных артериях проводилось методом конечных элементов с использованием программного

обеспечения COMSOL Multiphysics®. Для задания начальных и граничных условий использовались особенности распределения давления в сосудистом русле сердца и данные ультразвуковой диагностики скорости кровотока в коронарных артериях при выходе из аорты. На этапе построения 3D-геометрии, один пациент выбыл, поскольку качество его КТ-данных было снижено ввиду вариабельной частоты сердечных сокращений во время исследования.

Проведенный вычислительный эксперимент показал, что распределение давления крови хорошо согласуется с данными FFR, измеренными инвазивно. В данной работе нами был рассмотрен вопрос, связанный с невозможностью построения 3D-геометрии коронарных артерий по КТ-данным, для тех случаев, когда имеются артефакты: обусловленные движением пациента, нерегулярности сердечного ритма, низкого контраста. Выявленные факторы могут ухудшать точность расчета FFR по причине невозможности точно различить границу стеноза и просвета артерии.

Результаты исследования имеют значение для оценки гемодинамической значимости. Метод неинвазивного определения фракционного резерва кровотока позволит получать точную, персонализированную оценку гемодинамической значимости стеноза без вмешательств в организм пациента, что позволит проводить более оперативную диагностику и персонализировать назначенное лечение.

Список публикаций:

[1] Timmis A., Townsend N., Gale C.P., et al. *European Society of Cardiology: Cardiovascular Disease Statistics 2019*. // *Eur Heart J*. 2020. V. 41. № 1. P. 12-85.

[2] Tonino P.A., De Bruyne B., Pijls N.H., et al. *Fractional flow reserve versus angiography for guiding percutaneous coronary intervention*. // *New Engl. J. Med*. 2009. V. 360. №3. P. 213-224.

Комбинированная модель динамики ДНК

Балашова Валентина Николаевна

Уфимский университет науки и технологий

Закирьянов Фарит Кабирович, к.ф.-м.н.

farni@rambler.ru

Хорошо известно, что угловые модели нелинейной динамики молекулы ДНК адекватно описывают конформационные изменения молекулы в процессе её функционирования. При моделировании функциональных движений ДНК наиболее эффективным оказался поиск подходящего механического аналога. Угловая модель состоит из двух параллельных осей с прикрепленными к ним маятниками – точечными массами на палочках определённой длины [1]. Водородные связи описываются через взаимное притяжение оснований – точек, для каждой из которых существует единственная степень свободы – торсионный угол ϕ . Но невозможность прямого сравнения расчётных данных с экспериментами сильно ограничивала применение угловых моделей и серьёзно затрудняла определение их параметров.

По этой причине наряду с угловыми моделями возник ещё один механический подход к изучению динамики ДНК – поперечные модели [2]. Для описания водородных связей в поперечной механической модели был использован потенциал Морзе. Поперечные модели прекрасно зарекомендовали себя для описания процессов денатурации молекулы ДНК. Параметры этих моделей получили надёжное экспериментальное обоснование и хорошо известны [3].

В настоящей работе мы объединили эти два подхода и совместили «геометрию» угловых моделей с потенциалом Морзе, описывающим динамику поперечных моделей.

Предлагаемая нами комбинированная модель ДНК имеет следующую структуру (рис.1):

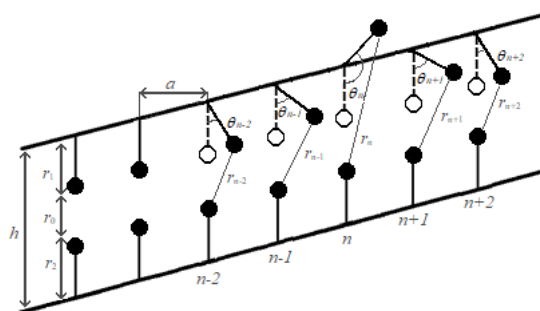


рис. 1. Комбинированная модель ДНК

Здесь θ_1 и θ_2 – углы поворота оснований вокруг сахаро-фосфатного остова в первой и второй цепочках соответственно; r_1 и r_2 – расстояния от сахаро-фосфатных цепочек до азотистых оснований; a и r_0 – расстояния между азотистыми основаниями внутри и между цепочками. Взаимодействие между комплементарными основаниями описывается потенциалом Морзе: $U(\Delta r) = D(e^{-a(r-r_0)} - 1)^2$, где D – параметр, определяемый экспериментально. Уравнения движения получаются из $I_k \ddot{\theta}_k = \frac{\partial U}{\partial \theta_k}$, где $k = 1, 2$; I_1 и I_2 – моменты инерции оснований.

Уравнения движения имеет солитонные решения в виде кинков (рис. 2), параметры которых (ширина, импульс и энергия) уже можно сравнить с экспериментальными результатами.

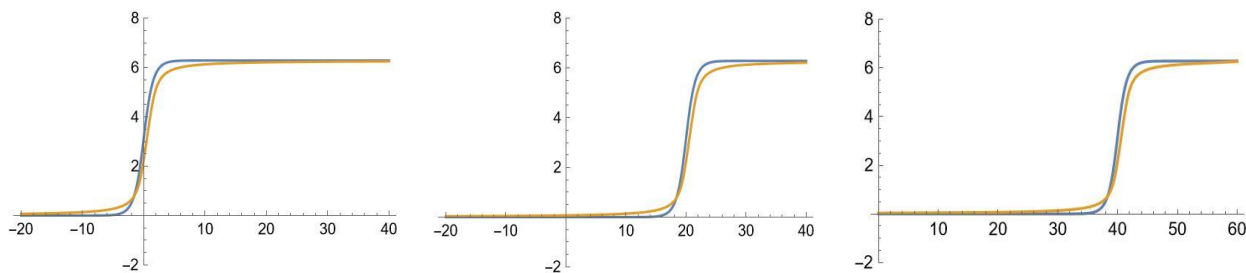


рис. 2. Сравнение решений традиционной угловой и комбинированной моделей ДНК

Список публикаций:

- [1] S.W. Englander, N.R. Kallenbach, A.J. Heeger, J.A. Krumhansl, A. Litwin. *Nature of the open state in long polynucleotide double helices: possibility of soliton excitations* // PNAS USA 77, 1980. – P. 7222–7226.
 [2] M. Peyrard and A.R. Bishop. *Statistical mechanics of a nonlinear model for DNA denaturation* // Phys. Rev. Lett. 62, 1989. – P. 2755–2758.
 [3] M. Peyrard, A.R. Bishop and Th. Dauxois. *Dynamics and thermodynamics of a nonlinear model for DNA denaturation* // Phys. Rev. E 47, 1993. – P. 684–697.

Измерение вольт-амперных характеристик олигонуклеотидов с известной последовательностью звеньев

Кудояров Данил Шамилевич

Уфимский университет науки и технологий

Шарипов Талгат Ишмухамедович, к.ф.-м.н.

danilkud@mail.ru

Цель нашей работы состояла в получении данных атомно-силовой микроскопии и сканирующей-туннельной спектроскопии олигонуклеотидов, которые представляют собой последовательности только одного вида нуклеотида: аденина (dA_{12}) либо цитозина (dC_{12}).

Для получения изображений олигонуклеотидов и оценки их осаждаемости на поверхность подложки мы использовали атомно-силовой микроскоп (АСМ), для измерения вольтамперных характеристик (ВАХ) применяли сканирующий-туннельный микроскоп (СТМ). Для исследования были использованы олигонуклеотиды с повторяющейся последовательностью, состоящие из 12 одинаковых звеньев.

Термически напыленное в вакууме золото на поверхность слюды использовали в качестве подложек. Раствор олигонуклеотидов нагревали до 85 градусов Цельсия для развертывания молекул-нитей, так как они находятся в состоянии глобул. 5 мкл раствора прикапывали на поверхность золотой подложки. После чего ждали полного высыхания капли в атмосфере воздуха.

Сначала получили данные СТМ поверхности подложки с напыленным в вакууме золотом и измерили её ВАХ во многих точках поверхности (рис.1). Видно, что поверхность имеет малую шероховатость, а ВАХ имеет типичный для металлов вид.

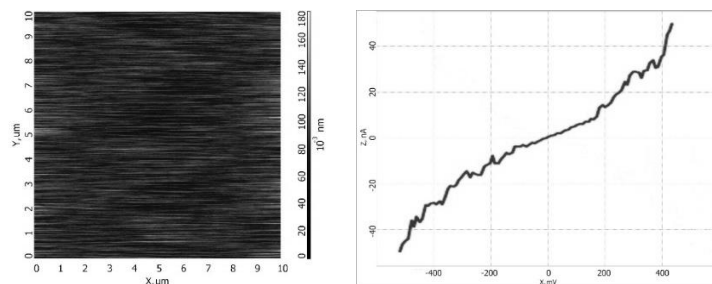


рис.1. а) данные сканирующей-туннельной спектроскопии поверхности подложки с напыленной пленкой золота; б) усредненная вольт-амперная характеристика пленки золота.

Затем получили данные АСМ олигонуклеотидов dA_{12} , осажденных на поверхности золотой подложки (рис.2а).

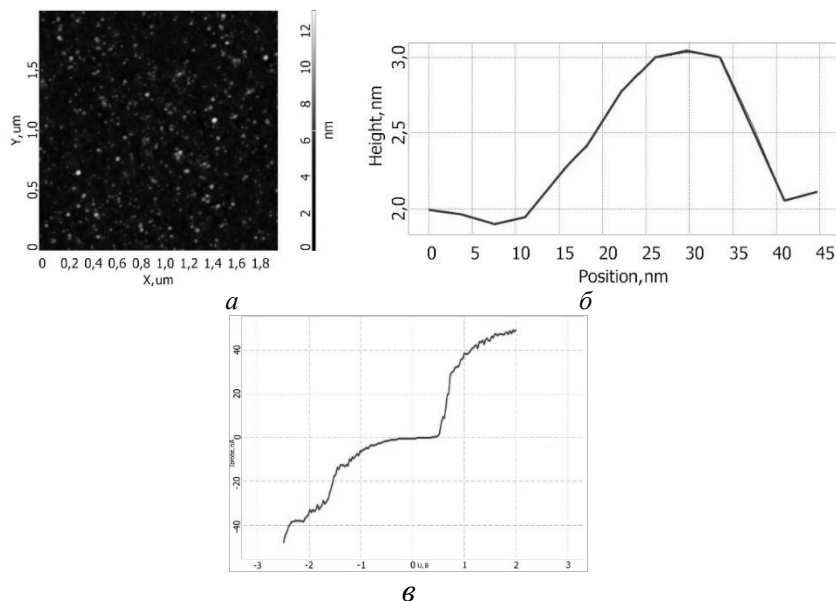


рис.2 - а) АСМ-изображение олигонуклеотидов dA_{12} ; б) профиль сечения кластера олигонуклеотида, выполненного по линии, проведенной на рисунке 2а; в) вольтамперная характеристика олигонуклеотидов dA_{12} .

На АСМ-изображении видны образования сферической формы, по одной из них выполнено сечение (рис.2б). По профилю сечения видно, что размер по латерали составляет около 27 нм, а высота – около 1 нм. Была получена ВАХ макромолекулы (рис.2в). Кривая ВАХ олигонуклеотидов dA_{12} имеет характерный для полупроводников вид. На ВАХ видно, что заметное увеличение туннельного тока происходит при напряжениях, приложенных между кончиком зонда и молекулой, более 0,4 В. При напряжениях от -0,3 В до 0,3 В наблюдается плато без возражений туннельного тока.

Соответствующие измерения ВАХ были выполнены и для другого типа олигонуклеотидов. Кривая вольт-амперной характеристики олигонуклеотидов dC_{12} имеет вид схожий с ВАХ полупроводников. Увеличение туннельного тока наблюдается при напряжениях, приложенных между кончиком зонда и молекулой, более 0,9 В, резкое же возрастание туннельного тока наблюдается при 1,3 В. При напряжениях от -0,9 В до 0,9 В наблюдается плато без возрастания туннельного тока.

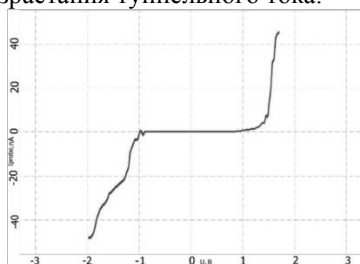


рис.4 - Вольтамперная характеристика олигонуклеотидов dC_{12} на поверхности золотой подложки.

Можно сказать, что проводимость исследуемых олигонуклеотидов ниже, чем проводимость золота. Сравнивая вольт-амперные характеристики видно, что в среднем проводимость олигонуклеотидов dA_{12} выше,

чем проводимость dC_{12} . Полученные данные в будущем могут быть использованы для сравнительного анализа проводимости других нуклеотидов.

Список публикаций:

[1] Ryndyk, D., Shapir, E., Porath, D., Calzolari, A., Di Felice, R., & Cuniberti, G. *Scanning Tunneling Spectroscopy of Single DNA Molecules* // ACS Nano, 2009. – №3(7). – С. 1651–1656.

[2] Кудояров Д.Ш., Толеков Д.А., Муллагалиев И.Н., Шарипов Т.И. Исследование физических свойств гомоолигонуклеотидов. // *Фундаментальная математика и ее приложения в естествознании: спутник Международной научной конференции «Уфимская осенняя математическая школа-2022»: тезисы докладов XIII Международной школы-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых, посвященной 50-летию образования математического и физического факультетов БашГУ (г. Уфа, 19 – 22 октября 2022 г.) / отв. ред. Л.А. Габдрахманова. – Уфа: РИЦ БашГУ, 2022. С. 61-62*

Локальная атомная структура ионов Zn^{2+} при взаимодействии $ZnCl_2$ низкой концентрации с ленгмюровским монослоем арахидоновой кислоты: теоретический анализ спектров XANES

Лысенко Виктория Юрьевна

Кременная Мария Андреевна

Южный федеральный университет

Яловега Галина Эдуардовна, д.ф.-м.н.

viktoriya.250699@mail.ru

Исследование изменений с течением времени в локальном атомном окружении ионов цинка в водном растворе $ZnCl_2$ в присутствии монослоя арахидоновой кислоты представляет собой интерес с точки зрения биологии, так как может выступать в качестве упрощенной модели процесса взаимодействия металла с клеточной мембраной. Одним из методов, исследующих механизмы взаимодействия липид-металл, применимый для систем с малой концентрацией поглощающих атомов, является метод рентгеновской спектроскопии поглощения XANES.

Проведен анализ экспериментальных спектров XANES за К-краем цинка из растворов $ZnCl_2$ различной концентрации ($6 \cdot 10^{-4}$, $6 \cdot 10^{-5}$, $3 \cdot 10^{-6}$ моль/литр) в присутствии монослоя арахидоновой кислоты на поверхности раствора в ленгмюровской ванне методами «отпечатка пальца» и теоретического моделирования спектров рентгеновского поглощения для К-края.

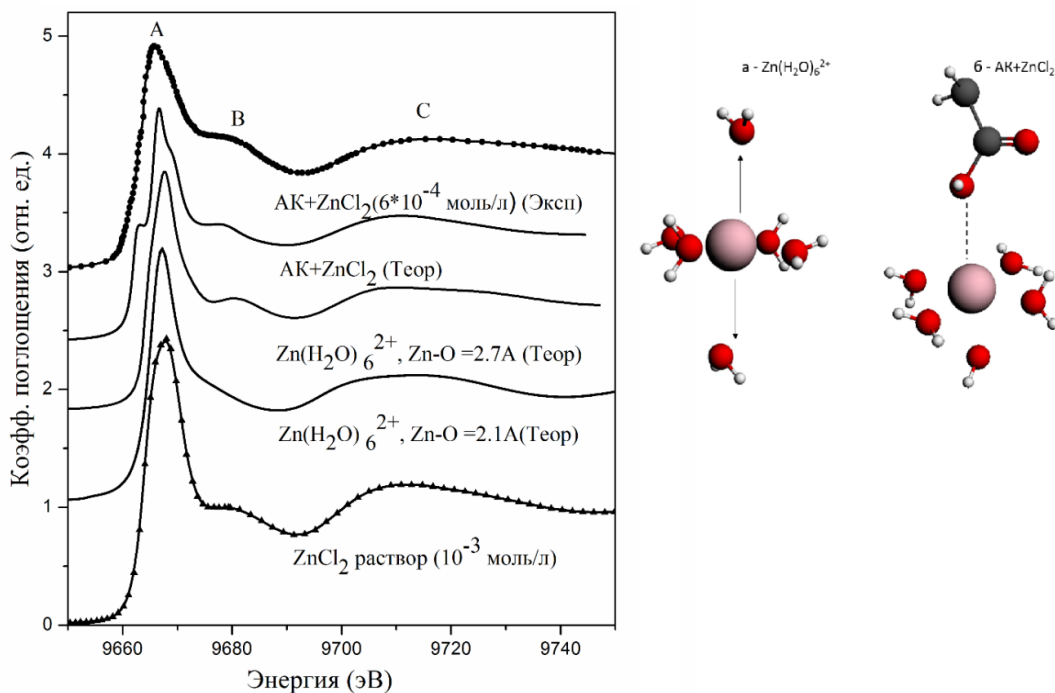


рис.1. Сравнение теоретических спектров XANES за К-краем цинка для модели $Zn(H_2O)_6^{2+}$ (а) и $AK+ZnCl_2$ (б) с экспериментальными спектрами раствора $ZnCl_2$ и $AK+ZnCl_2(6 \cdot 10^{-4})$

Анализ спектров XANES свидетельствует о том, что локальное окружение ионов цинка изменяется с течением времени и в процессе взаимодействия под монослоем не образуются наночастицы ZnO, что было показано в работе [1]. Теоретическое моделирование спектров XANES показало, что одним из способов взаимодействия арахидоновой кислоты с цинком является межмолекулярное взаимодействие между катионом цинка и карбоксильной группой арахидоновой кислоты.

Авторы выражают благодарность Гранту Президента МК-2767.2021.1.2 за финансовую поддержку исследования.

Список публикаций:

[1] Kremenaya M. A., et al., *Journal of Physics: Conference Series*: 2021. №2103, С. 012171.

Моделирование процесса СВЧ отогрева глубокого обморожения

Нечаев Александр Николаевич

Национальный исследовательский Томский государственный университет

Дунаевский Григорий Ефимович

Sasha8227039@gmail.com

Эффективность отогрева обморожения конечности с помощью СВЧ- была доказана на животных (кролики) [1]. Для масштабного перехода от маленькой конечности животного к крупной конечности человека необходимо решение большого числа новых задач. Размеры конечности человека, состав и объемы биологических тканей существенно отличаются. Кроме того, необходимо не только обеспечить близкий к равномерному прогрев всего объема холодной травмы, уделяя особое внимание замедленному отогреву «критических зон» (ладоней, пальцев рук). Принципиальная возможность решения этих задач была показана авторами в прежних этапах работы [2, 3, 4, 5, 6].

В связи с этим в программе для 3D-моделирования была построена модель фантома конечности руки человека, позволяющая масштабно изменять её размеры. Фантом имеет упрощенную геометрическую форму набора малых плоских областей.

При более мелком разбиении модели на элементарные ячейки точность воспроизведения конфигурации руки (пальцев, ладони, предплечья) возрастет, нократно увеличится и время вычислений распределения полей. Выбранный в данной работе размер ячейки достаточен и для воспроизведения конфигурации руки при печати оболочки фантома, и для быстрых вычислений распределения полей. Размеры модели руки: высота – 46 см, ширина ладони – 8,5 см, длина среднего пальца – 7,5 см. Для 3D-печати оболочки фантома конечности человека использовался пластик ABS. Диэлектрическая проницаемость используемого пластика ABS на частоте 2,45 ГГц: действительная часть составляет: $\epsilon' = 2,7$, мнимая: $\epsilon'' = 0,1$. Толщина стенок фантомов, созданных методом 3D-печати, составила 2 мм.

Наполнитель фантома имитирует биологическую ткань человека. Подробно методика моделирования биотканей сложными растворами описана в работе [7]. Подбором состава и концентрации различных наполнителей в этой работе получены растворы, по своим диэлектрическим параметрам, близким к значениям соответствующих параметров мышечной тканей человека.

Для исследований объемного распределения тепловых полей в вышеописанных фантомах применялась описанная в [6] экспериментальная установка.

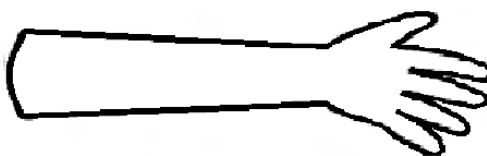
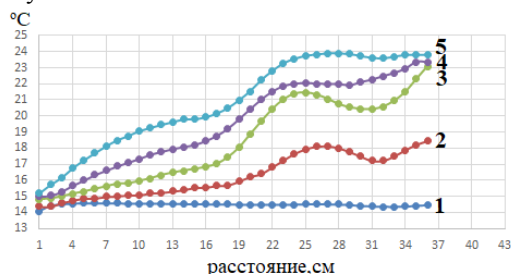


рис.1. – Распределение температуры вдоль центральной оси фантома взрослой руки до СВЧ-нагрева (1), и после 4-х сеансов нагрева (2), (3), (4) и (5)

На рисунке 1 приведены результаты измерения распределений тепловых полей вдоль центральной оси фантома взрослой руки. Перед началом эксперимента фантом охлаждался до температуры ниже 15 °С, соответствующей температуре холодового ишемизирования сосудов [8], после чего размещались в камеру. Затем закрывался защитный чехол, включался генератор, уровень мощности генератора устанавливался равным 40 Вт, и осуществлялся нагрев камеры в течение 6 минут. Затем защитный рукав открывался и производилось погружение термодатчика вдоль той же оси фантома (распределение (2)). После чего термометр извлекался, закрывался защитный чехол и снова осуществлялся нагрев в течение 6 минут при том же уровне мощности. Затем снова измерялось распределение температуры вдоль центральной оси. Подобные сеансы нагрева с последующими измерениями осуществлялись в фантоме 4 раза.

По результатам измерений хорошо видны области более быстрого нагрева в сечениях сужения фантома. Самым важным здесь результатом является соотношение максимальных значений температуры после одинаковых по длительности и мощности процедур нагрева. Для взрослой эта температура составила 24 °С.

Список публикаций:

- [1] Горелик, И.Э // Профилактика некроза при отморожениях конечностей в до-реактивном и раннем реактивном периодах: специальность 14.00.27 «Хирургия», 14.00.16 «Патологическая физиология»: автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата медицинских наук: / Горелик Игорь Эрнестович; Кемерово, 2010. – 22 с. – Место защиты: Кемеровский государственный медицинский университет МЗ РФ.
- [2] Экспериментальное обоснование возможности использования сверхвысоко-кочастотного излучения малой мощности в раннем реактивном периоде при глубоких холодовых травмах: отчет о НИР / руководитель Г.Е. Дунаевский; Проект № 8.2.09.2016, выполненный в рамках Программы повышения конкурентоспособности ТГУ, мероприятие 8.2.
- [3] Исследование особенностей микроволнового отогрева отморожения конечности, обусловленных неоднородностями электромагнитного поля: отчет о НИР / руководитель Г.Е. Дунаевский; Проект № 8.2.35.2018, выполненный в рамках Программы по-вышения конкурентоспособности ТГУ, мероприятие 8.2 – Томск, 2018. – 98 с. – Рег. № НИОКТР АААА-Б19-21902139005-6.
- [4] Исследование динамики изменений электромагнитного и теплового полей в объеме фантома конечности при малоомощном микроволновом нагреве: отчет о НИР / руководитель Г.Е. Дунаевский; Проект № 8.2.35.2018Л, выполненный в рамках Программы повышения конкурентоспособности ТГУ, мероприятие 8.2. – Томск, 2019. – 95 с. – Рег. № НИОКТР АААА – Б20 – 22002119011-2.
- [5] Исследование динамики изменений электромагнитного и теплового полей в объеме фантома конечности при малоомощном микроволновом нагреве: отчет о НИР / руководитель Г.Е. Дунаевский; Проект № 8.2.35.2018Л, выполненный в рамках Программы повышения конкурентоспособности ТГУ, мероприятие 8.2. – Томск, 2019. – 95 с. – Рег. № НИОКТР АААА – Б20 – 22002119011-2.
- [6] Исследование конфигураций тепловых полей, создаваемых радиоволновым излучением в «критических» локальных зонах отогреваемой конечности: отчет о НИР / руководитель Г.Е. Дунаевский Проект № 8.2.35.2018, выполненный в рамках Программы повышения конкурентоспособности ТГУ, мероприятие 8.2 – Томск, 2020. – 111 с. – Рег. № НИОКТР АААА А18-118110890046-7.
- [7] Agilent E8363B. – URL: <https://www.testunlimited.com/pdf/an/E8364-90027.pdf>.
- [8] Гаврилин, Е.В // Регионарные нарушения внутрикостной гемодинамики в патогенез и лечении криотравмы конечностей: специальность 14.00.27 «Хирургия», 14.00.16 «Патологическая физиология»: автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата медицинских наук: / Гаврилин Евгений Владимирович; Томск, 2001. – 39 с. – Место защиты: Сибирский государственный университет МЗ РФ.

Изучение взаимодействия радиопротекторного ДНК-связывающегося белка Dsup с модельной ДНК методами малоуглового рассеяния и атомно-силовой микроскопии

Низамиева Альбина Фаритовна

Казанский (Приволжский) федеральный университет

Горшкова Юлия Евгеньевна, к.ф.-м.н.

alb9061@yandex.ru

Дезоксирибонуклеиновая кислота (ДНК) представляет собой макромолекулу, обеспечивающую хранение, передачу из поколения в поколение и реализацию генетических инструкций для развития, функционирования, роста и размножения всех известных организмов и многих вирусов. ДНК необходима для выживания клеток, поэтому её повреждения под воздействием УФ-излучения, γ -радиации и других факторов особенно опасны. Существуют, однако, адаптированные к экстремальным условиям окружающей среды организмы, одними из которых являются тихоходки.

Группа ученых из Японии обнаружила, что своей радиорезистентностью тихоходки обязаны уникальным ядерным белкам, одним из которых является Dsup (damage suppressor). В своей работе [1] исследователи показали, что белок Dsup может повышать устойчивость клеток человека к повреждению ДНК в условиях ионизирующего излучения или обработки перекисью водорода на 40 %.

Dsup представляет собой неупорядоченный сильно заряженный ядерный белок. На данный момент большая часть работ, предметом исследования которых является Dsup, сфокусирована на биологических аспектах его изучения. Исследования на тему физических и структурных свойств белка Dsup и взаимодействия Dsup с ДНК на данный момент не опубликованы, что обуславливает актуальность и новизну данной темы.

Для исследования структуры ДНК и комплекса Dsup-ДНК были использованы методы атомно-силовой микроскопии (АСМ) и малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР). В ходе нашего исследования методом АСМ были получены изображения модельной ДНК и комплекса Dsup-ДНК на слюде с конечными концентрациями макромолекул 1 мкг/мл (рис. 1а-б). При соотношении Dsup/ДНК 85/1 комплекс полностью сворачивается (рис. 1б), что не дает возможности исследовать его структуру методом АСМ. Очевидно, что для выявления всех этапов структурных изменений ДНК в присутствии белка Dsup от связывания до полного сворачивания необходимо провести прецизионные исследования при различных соотношениях концентраций белка Dsup и ДНК.

Для изучения структуры белка Dsup и комплекса Dsup-ДНК в нативной среде (использован буфер PBS, pH = 7,4) был выбран метод МУРР. Обнаружено, что в белке Dsup и комплексе Dsup-ДНК присутствуют 2 структурных уровня (рис. 2а). Для белка Dsup радиусы инерции равны $R_{g1} = 126,2 \text{ \AA} \pm 0,54 \text{ \AA}$ и $R_{g2} = 10,6 \text{ \AA} \pm 0,21 \text{ \AA}$. Для комплекса Dsup-ДНК радиусы инерции равны $R_{g1} = 128,4 \text{ \AA} \pm 0,23 \text{ \AA}$ и $R_{g2} = 9,3 \text{ \AA} \pm 0,43 \text{ \AA}$. Построение Кратки (рис. 2б) указывает на тот факт, что формы белка Dsup и комплекса Dsup-ДНК склонны к компактизации и представляют собой частично гибкие структуры.

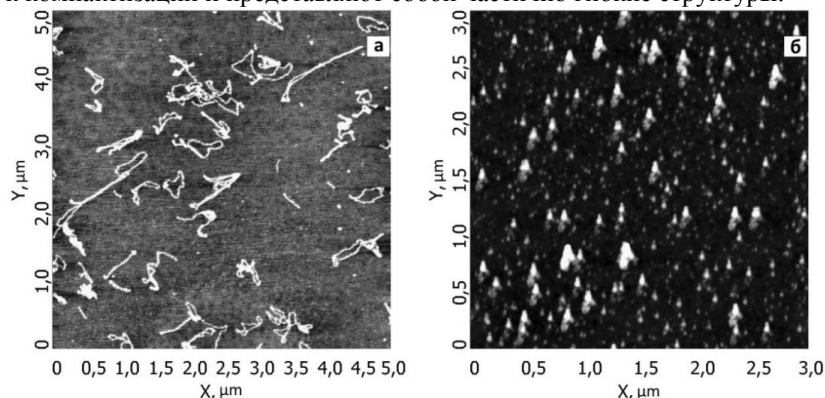


рис. 1. а – молекулы ДНК иммобилизованные на слюде; б – комплекс Dsup-ДНК на слюде

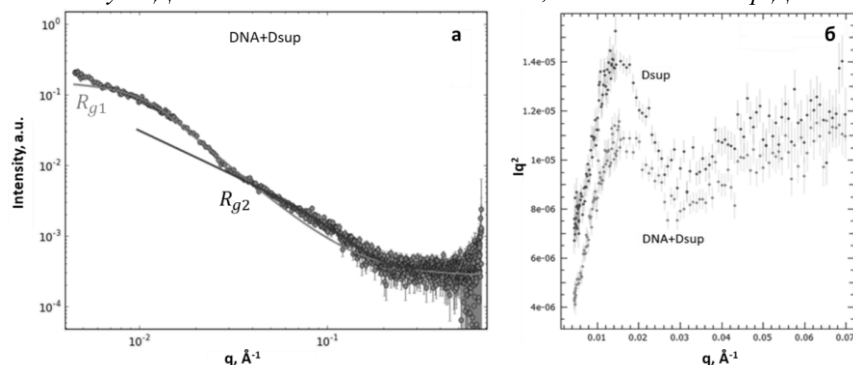


рис. 2. а – кривая МУРР для комплекса Dsup ДНК (точки) и подгонка функцией Гинье-Пород (серая и черная линии) для двух структурных уровней, б – построение Кратки для белка Dsup и комплекса Dsup-ДНК (концентрация белка – 5 мг/мл, ДНК – 60 мкг/мл).

Важно отметить, что компактизация комплекса Dsup-ДНК при рассмотренном соотношении концентраций наблюдается как методом АСМ, так и МУРР. Таким образом, видим, что данные полученные этими комплементарными методами хорошо согласуются друг с другом.

Список публикаций:

[1] Hashimoto T. et al. Extremotolerant tardigrade genome and improved radiotolerance of human cultured cells by tardigrade-unique protein // Nature communications, 2016. V. 7. №. 1. P.1-14

Исследование локальной атомной структуры Zn^{2+} в дополнительных центрах связывания молекулы гемоглобина: теоретический анализ спектров XANES

Пронина Екатерина Вячеславовна

Кременная Мария Андреевна

Южный федеральный университет

Яловега Галина Эдуардовна, д.ф.-м.н.

epronina@sfedu.ru

Известно, что под воздействием неблагоприятных факторов наблюдается кумуляция переходных металлов на биоорганических макромолекулах, что приводит к нарушению пространственной структуры белка и последующему образованию нефункциональных структур со сниженной активностью [1], [2].

В данной работе возможные структурные модели дополнительных центров связывания переходного металла Zn в молекуле гемоглобина были построены на основе данных Protein Data Bank (PDB): модель цинка, связанного с цистеином, гистидином, глутамином и аспарагиновой кислотой. Для полученных моделей были рассчитаны спектры рентгеновского поглощения XANES для К-края цинка методом конечных разностей, спектры сопоставлялись с экспериментальными спектрами, полученными из работы [3].

Спектры, рассчитанные теоретически для выбранных моделей, показывают повторение спектральных особенностей экспериментального спектра поглощения цинка (Рис.1). Сопоставление теоретических и экспериментальных спектров поглощения для различных структурных моделей показало чувствительность данного метода к изменениям межатомных расстояний и углов связи ионов цинка.

Проанализированные данные позволяют утверждать, что при использовании моделирования и теоретических расчетов спектров поглощения возможно определить локальное окружение атома цинка методом спектроскопии рентгеновского поглощения.

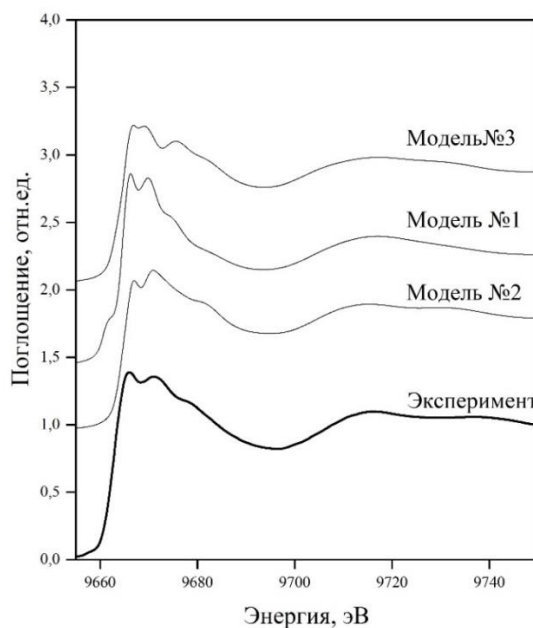


рис.1. Сопоставление теоретического и экспериментальных спектров поглощения цинка в дополнительном центре молекулы гемоглобина

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ N 19-29-12052 мк.

Список публикаций:

- [1] Gomes, Cláudio M. (2019). *Biophysical and Spectroscopic Methods for Monitoring Protein Misfolding and Amyloid Aggregation* // [Methods in Molecular Biology, Protein Misfolding Diseases Volume 1873 (Methods and Protocols), 10.1007/978-1-4939-8820-4(Chapter 1), 3–18.
- [2] Reeg, Sandra; Grune, Tilman, *Protein Oxidation in Aging: Does It Play a Role in Aging Progression?* // *Antioxidants & Redox Signaling*, 2015, 23(3), 239–255.
- [3] Н. Н. Новикова, С. Н. Якунин, М. В. Ковальчук, Э. А. Юрьева, Н. Д. Степина, А. В. Розачев, М. А. Кременная, Г. Э. Яловега, О. В. Космачевская, А. Ф. Топунов *Возможности рентгеновской абсорбционной спектроскопии в геометрии полного внешнего отражения для исследования белковых пленок на жидкости*//*Кристаллография*. 2019. Т.64, №6, с.931-937

Совместное воздействие урана-238 и биоактивных соединений на скорости процессов биолюминесцентной биферментной системы

Семенова Александра Алексеевна

Медведев Вадим Викторович

Национальный исследовательский Томский политехнический университет

Сачкова Анна Сергеевна, к.б.н.

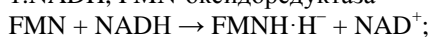
aas296@tpu.ru

Существующий факт загрязнения ураном окружающей среды требует отслеживать количество этого элемента в природных водах до допустимых концентраций [1]. Уран и его соединения токсичны. При попадании в организм уран действует на все органы, являясь общеклеточным ядом. Уран практически необратимо, как и многие другие тяжелые металлы, связывается с белками, прежде всего, с сульфидными группами аминокислот, нарушая их функцию.

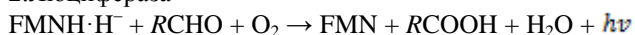
Перспективными биоактивными агентами для снижения токсичности являются гуминовые вещества и фуллеренолы – нанообъекты природного и антропогенного происхождения.

В последнее время биолюминесцентный анализ стал одним из перспективных экспрессных методов биологического мониторинга водной среды [2]. Также, с его помощью можно изучать механизмы снижения токсичности поллютантов [3]. В работе использовали люминесцентную систему двух сопряженных реакций, катализируемых ферментами NAD(P)H:FMN-оксидоредуктазой и люциферазой:

1. NADH, FMN-оксидоредуктаза



2. Люцифераза



Данная система является моделью живой клетки по изменению её параметров можно косвенно судить о состоянии организма.

Было исследовано влияние нитрата уранила на скорость окисления NADH – восстановителя люминесцентной системы двух сопряженных реакций, катализируемых ферментами NAD(P)H:FMN-оксидоредуктазой и люциферазой, а также исследованы механизмы снижения токсичности растворов U^{238} гуминовыми веществами и фуллеренолом - $\text{C}_{60,70}(\text{OH})_{20-24}$.

Работа выполнена на спектрофотометре ПЭ - 5400ВИ ЭКРОС. Используемые реактивы: NADH; FMN, KH_2PO_4 и K_2HPO_4 , Гуминовые вещества (ГВ, Гумат-80), азотнокислый уран; фуллеренол $\text{C}_{60,70}(\text{OH})_{20-24}$ и комплекс реактивов аналитической биолюминесценции (КРАБ).

Проводили измерения скорости окисления NADH в реакционных смесях разного состава при длине волны 340 нм. Порядок реакции считаем псевдопервым. Расчет изменения скорости окисления NADH проводили по формуле: $V = -\Delta C / \Delta t$.

Влияние U^{238} на скорость окисления NADH изучали с использованием растворов различного состава. Добавление растворов нитрата уранила как к раствору NADH, так и к смеси NADH + FMN приводило к снижению скоростей процессов. Так, скорость автоокисления NADH снизилась в 2,26 раза (2,3 против 5,1) $\cdot 10^{-7}$, (моль/л)·мин, а скорость биохимической реакции NADH + FMN в 2,6 раза (3,6 против 9,5). Известно, что роль металла в используемой соли урана выполняет катион уранила $[\text{UO}_2]^{2+}$. Ранее, коллегами из Института биофизики СО РАН города Красноярска было показано, что уран приводит к снижению интенсивности биолюминесценции, что свидетельствует о его токсическом воздействии даже при малых концентрациях.

Стоит отметить, что и ГВ, и фуллеренол снижают токсичность раствора урана. Скорость взаимодействия NADH + FMN составляет 9,48 (моль /л)·мин, в то время как добавление раствора урана снижает ее до 3,6, но добавление $\text{C}_{60,70}(\text{OH})_{20}$ ускоряет процессы до $7,02 \cdot 10^{-7}$, (моль /л)·мин, т.е. снижают токсический эффект в 2 раза. Для ГВ получена аналогичная тенденция, но снижение токсичности произошло в 1,7 раза. Снижение скорости процесса при добавлении растворов нитрата уранила может быть связано как с радиационными, так и с химическими механизмами токсического воздействия уранил-иона. Снижение токсического эффекта в присутствии ГВ или $\text{C}_{60,70}(\text{OH})_{20-24}$, предположительно связано с тем, что ГВ и фуллеренол работают как катализатор внутренних окислительно-восстановительных процессов.

Таким образом, было определено влияние нитрата уранила на скорость биохимических процессов биолюминесцентной системы, катализируемой NAD(P)H:FMN-оксидоредуктазой и люциферазой. Показана перспективность использования ГВ и $\text{C}_{60,70}(\text{OH})_{20-24}$ в качестве детоксикантов растворов нитрата уранила.

Список публикаций:

[1]. Орумо К., Елохин А. П., Ксенофонтов А. И. // Глобальная ядерная безопасность. 2020. Т. 35. № 2. С. 16-41.

[2]. Безруких А.Е., Есимбекова Е.Н., Кратасюк В.А. // Journal of Siberian Federal University. Biology. 2011. Т. 4. № 1. С. 64-72.

[3]. Колесник О.В., Рожко Т.В., Лапина М.А., Соловьёв В.С., Сачкова А.С., Кадрьшиева Н.С. // MDPI. Bioengineering. 2021. Т. 8. № 194. С. 1–13.

Распределение СВЧ-поля в камере микроволнового отогрева, работающей на частоте ниже критической, при вариации размера конечности

Смыгалина Полина Павловна

Национальный исследовательский Томский государственный университет

Дунаевский Григорий Ефимович, д.т.н.

psmygalina@gmail.com

Обморожение конечностей представляет собой повреждение тканей, возникающее при воздействии низких температур. Задача эффективного и быстрого лечения обморожений особо остро стоит в странах с холодным климатом, в высокогорных районах, а также в полевых условиях. В то же время как аппаратура для лечения холодных травм по настоящее время отсутствует не только в России, но и за рубежом [1, 2]. В связи с этим актуальной становится задача разработки компактной переносной аппаратуры для лечения обморожений. Использование теплового эффекта воздействия микроволновых волн является эффективным при отогреве конечности. С целью уменьшить размер устройства для СВЧ-отогрева, а также иметь возможность получить предсказуемое распределение СВЧ-поля в конечности, используется следующее конструкционное решение.

Представляемая камера для отогрева обморожений конечностей представляет собой отрезок волновода, критическая длина волны в котором меньше длины волны возбуждающих колебаний. В отсутствие конечности в объеме камеры, распространения волны не происходит. Однако, размещение в такой камере конечности человека, обладающей высокой диэлектрической проницаемостью, должно приводить к переходу к возбуждению колебаний в волноводе без существенных отражений.

Моделирование распределения СВЧ-поля в камере производилось в среде CST Studio Suite. Габариты описанной камеры 20x30x50 см. Для данных габаритов частота 433 МГц будет ниже критической. Возбуждение электромагнитной волны осуществляется с помощью петлевой антенны. Прямоугольный фантом имитирует собой конечность человека. Значение диэлектрических характеристик фантома соответствует мышечной ткани человека на частоте 433 МГц: величина диэлектрической проницаемости 63,6, проводимость 0,98 См/м [3]. Были рассмотрены прямоугольные фантомы трех различных размеров сечения: 6x6 см, 8x8 см, 10x10 см. Длина фантома 55 см. Результаты моделирования представлены на рисунке 1.

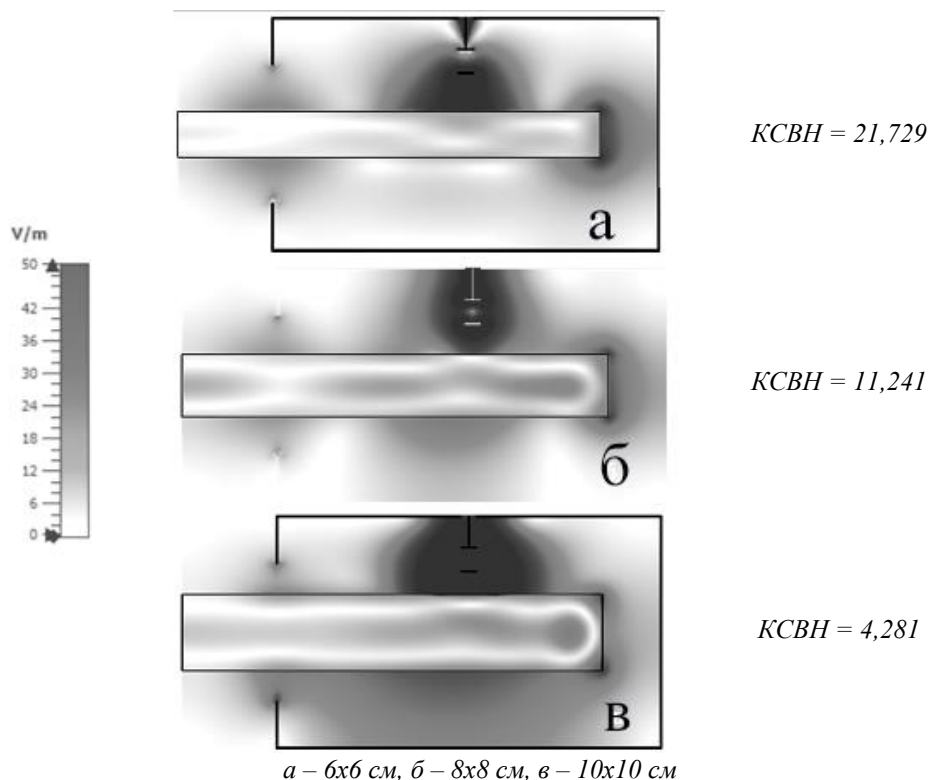


рис.1. Распределение электрического поля за пределами волновода при различных размерах фантома

Представленные на рисунке 1 распределения полей в центральном сечении фантома наглядно демонстрируют, что при увеличении размера фантома, а точнее при увеличении объема заполнения полости камеры диэлектриком со свойствами биологических тканей, СВЧ-поле распространяется эффективнее. Более

того, наблюдается концентрация поля в толщине фантома при размерах 8x8 см и 10x10 см, что свидетельствует о том, что нагрев происходит не только снаружи конечности, но и изнутри.

Список публикаций:

[1] Дунаевский Г. Е. // СВЧ - отогрев глубоких отморожений: новые результаты и новые задачи / Дунаевский Г. Е., Антипов В. Б., Гаврилин Е. В., Дорофеев И. О., Нечаев А. Н., Первеев И. А., Смыгалина П. П. // Актуальные проблемы радиофизики : IX Международная научно-практическая конференция, г. Томск, 20-22 октября 2021 г. Сборник трудов. – Томск : Издательский дом ТГУ, 2021. – 317 с.

[2] Исследование динамики изменений электромагнитного и теплового полей в объеме фантома конечности при маломощном микроволновом нагреве : отчет о НИР / руководитель Г.Е. Дунаевский; Проект № 8.2.35.2018Л, выполненный в рамках Программы повышения конкурентоспособности ТГУ, мероприятие 8.2. – Томск, 2019. – 95 с. – Рег. № НИОКТР АААА – Б20 – 22002119011-2.

[3] *Compilation of the Dielectric Properties of Body Tissues at RF and Microwave Frequencies. Tabulation of the experimental data referred to in Appendix C.* [Электронный ресурс]. – URL: <http://niremf.ifac.cnr.it/docs/DIELECTRIC/AppendixD5.html#D31>.

Оценка гемодинамической значимости стенозов в бифуркациях коронарных сосудов

Суюндукова Алмагуль Туктаровна

Демкин Владимир Петрович, Мельничук Сергей Васильевич, Завадовский Константин Валерьевич

Национальный исследовательский Томский государственный университет

Демкин Владимир Петрович

almagul.suyundukova@mail.ru

Ведущей причиной развития ишемической болезни сердца является атеросклероз коронарных артерий (КА), который ограничивает кровоток к сердечной мышце и может привести к тяжелым последствиям таким как инфаркт, острая сердечная недостаточность, и как следствие к летальному исходу. Важную роль в локализации и прогрессии атеросклероза играют гемодинамические факторы – разделение и рециркуляция потока и низкое колебательное напряжение сдвига стенки. Частыми случаями атеросклеротических поражений коронарных артерий являются стенозы бифуркационной локализации, наиболее подверженные гемодинамической нагрузке [1–3]. В бифуркационных областях КА возникает нарушение ламинарного кровотока, в результате чего происходит существенное изменение пристеночного напряжения сдвига (ПНС). Низкое ПНС обычно возникает на внутренних областях изгибов и проксимальных сужений артерий. Колебательное ПНС характеризуется значительными изменениями, как направления, так и средней величины в течение сердечного цикла. Колебательное ПНС отмечается, в основном, при дистальных сужениях и на латеральных стенках ветвей в бифуркации [2].

Современная диагностическая стратегия в отношении стабильной ИБС предполагает выполнение оценки степени стенозирования коронарных артерий и определение их гемодинамической значимости [4]. Актуальные рекомендации предлагают использование неинвазивной компьютерно-томографической коронарографии (КТКАГ) как теста первой линии у пациентов с низкой предстеновой вероятностью ИБС [4]. Однако данный метод не отвечает на вопрос о гемодинамической значимости стеноза, иными словами, не позволяет установить наличие ишемии, обусловленной конкретным стенозом. При этом важно подчеркнуть, что при наличии сужения КА менее 90 % , именно наличие ишемии является показанием для реваскуляризации.

В настоящее время эталонными методами оценки гемодинамической значимости стенозов, с которыми сравнивают другие методики, являются инвазивное определение фракционного резерва кровотока (FFR) и моментального резерва кровотока (iFR).

Определение фракционного резерва кровотока по данным компьютерно-томографической коронарной ангиографии (КТКАГ) является современным методом оценки ишемии миокарда [5]. Метод демонстрирует высокую информативность и позволяет с высокой точностью идентифицировать гемодинамически значимые стенозы. Однако в клинической практике метод используется недостаточно широко в связи с высокой стоимостью, а анализ КТКАГ проводит только фирма HeartFlow Inc [6]. В связи с этим разработка альтернативных решений для оценки ФРК для выявления значимых стенозов КА по данным КТКАГ, является актуальной задачей.

Численное моделирование кровотока в нормальных физиологических условиях является чрезвычайно трудной задачей ввиду сложной анатомии коронарных сосудов, гибкости артериальной стенки, пульсирующего потока, переменного сосудистого сопротивления и неньютоновских свойств крови. В общем случае гемодинамические процессы описываются трехмерными нестационарными уравнениями Навье-Стокса совместно с уравнениями динамики эластичных оболочек сосудов с учетом пространственной геометрии сосудов, физических свойств крови и вариации сердечной нагрузки.

В работе рассмотрена 3D-модель локальной гемодинамики коронарных сосудов и предложен метод вычисления коронарного кровотока для оперативной диагностики пациентов с атеросклеротическим бифуркационным поражением КА. Исходными данными для применения данной модели являются: геометрические параметры участка артерии, определяемые из МСКТ снимков, измеренные значения скорости кровотока и давления на границе микроциркулярного русла. Проведение расчетов данным методом не требует специализированного программного обеспечения, а осуществляется с помощью стандартных математических пакетов. Результаты расчетов ФРК, основанные на локальной физико-математической модели кровотока в коронарных артериях с бифуркационным поражением, хорошо согласуются с результатами инвазивных измерений ФРК и расчетов, основанных на более сложных моделях коронарной гемодинамики. Представленный в данной работе метод расчета ФРК позволяет оперативно провести персонализированную оценку значимости стеноза для принятия врачебного решения.

Список публикаций:

- [1] Koo B.K., Kang H.J., Youn T. J. et al.// *J Am Coll Cardiol*. 2005. V.46. P. 633-637.
- [2] Хелимский Д.А., Бадоян А.Г., Эралиев Т.К. и др.// *Российский кардиологический журнал*. 2020. Т. 25. № 5. С. 106–113.
- [3] Демкин В.П., Мельничук С.В., Завадовский К.В., Хоряк М.Н., Руденко В.В, Суюндукова А.Т., Кукарцева Д.Н., Цибулина А.О., Удут В.В.// *Известия высших учебных заведений. Физика*. 2021. Т. 64. №12. С. 172–178.
- [4] Knuuti J, Wijns W, Saraste A, et al.// *Eur Heart J*. 2020. V. 41. № 3. P. 407 – 477.
- [5]. Мочула А.В., Мальцева А.Н., Шипулин В.В. и др. // *Российский кардиологический журнал*. 2020. Т. 25. № 2. С. 74–80.
- [6] Rabbat M., Leipsic J., Vax J., et al.// *J. Am. Coll. Cardiol*. 2013. V.61. № 22. P. 2233 – 41.

Разработка системы для диагностики гематом мозга

Юрченко Екатерина Алексеевна

Национальный исследовательский Томский государственный университет

Торгаев Станислав Николаевич, к.ф.-м.н.

kattifi@mail.ru

В случае черепно-мозговых травм важно своевременно выявить наличие внутричерепных гематом. Наиболее точными методами выявления черепно-мозговых травм являются компьютерная и магниторезонансная томографии. Однако проведение обследования посредством томографии непосредственно после получения травмы практически отсутствует. В связи с этим является актуальной задача создания устройства, которое позволит оперативно выявлять наличие внутричерепных гематом.

В разрабатываемом устройстве, для выявления гематомы будет использоваться современный метод анализа различных объектов – ближняя ИК-спектроскопия. В основе метода лежит принцип поглощения молекулами вещества электромагнитных волн различного спектра, а интенсивность поглощения будет зависеть от количества и вида поглощаемого компонента в исследуемом объекте. В нашем случае диагностика и определение характеристик гематом (плотность, размер, местоположение) основаны на поглощении света на определенной частоте хромофором. Например, при наличии гематомы и использовании излучения в диапазоне длин волн от 700 до 900 нанометров большая часть излучения будет поглощена, и малая отразится.

Принцип диагностики внутричерепных гематом с использованием инфракрасного сканера базируется на обработке изображения молекулы гемоглобина, полученного с помощью облучения волнами ИК-спектра ближнего диапазона. Датчик оснащен источником ИК-волн и кремниевым приемником сигнала, и, через источник ИК, посылает инфракрасное излучение, которое попадает на область ткани через оптоволокно. Детектор принимает отраженный сигнал. Далее, сигнал поступает на ПК, который преобразует полученные данные для наглядного представления результата. В результате экспериментов будут получены наборы данных для анализа влияния характеристик гематом на регистрируемые сигналы. На основании полученных данных можно будет разработать методы анализа и обработки, в том числе с привлечением алгоритмов машинного обучения, позволяющие эффективно определять пространственную локализацию и геометрические параметры гематом.

Был разработан макет для проведения исследований (см. рис.1.), который состоит из системы 3D позиционирования (для возможности перемещения аналога гематомы в пространстве), фантом головы (включает в себя аналоги тканей человека), аналог гематомы (закрепляется на проволоке), источник и приемник излучения (расположенных над модельной средой имитирующей структуры головы), микроконтроллер для управления составляющими, и ПК для сбора и анализа данных. Таким образом, с помощью ПК есть возможность управления экспериментом и получения данных для дальнейшей обработки.

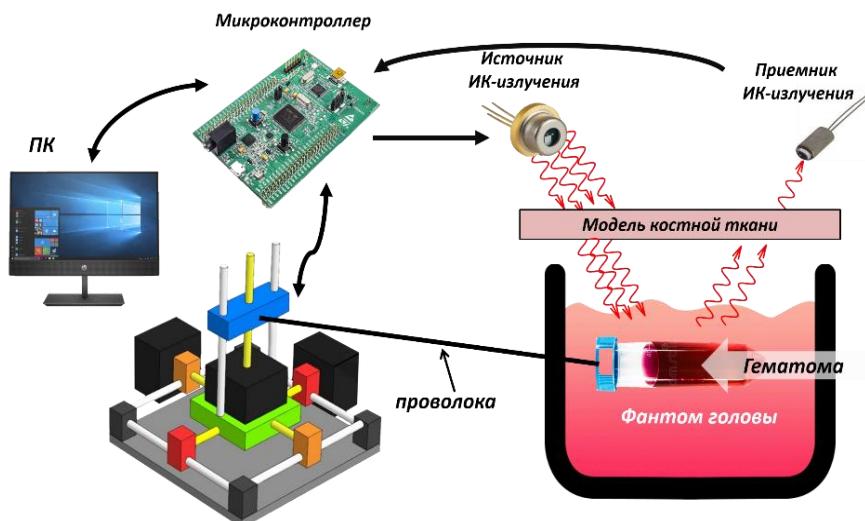


рис.1. Макет программно-аппаратного комплекса

В дальнейшем планируется реализация данного макета, подборка аналогов для тканей человека и проведение экспериментальных исследований с целью сбора данных. Также планируется разработать собственное программное обеспечение для визуализации результатов экспериментов и их машинного анализа.

Список публикаций:

[1] *Infrascanner in the Diagnosis of Intracranial Damage in Children with Traumatic Brain Injuries* – URL: pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/26653997/. (дата обращения: 15.03.2023).

[2] *ФУНКЦИОНАЛЬНАЯ ОПТИЧЕСКАЯ ТОМОГРАФИЯ: НАДЕЖНЫЙ МЕТОД ИЗМЕРЕНИЯ МОЗГОВОЙ АКТИВАЦИИ В ПРОЦЕССЕ РЕШЕНИЯ РАЗЛИЧНЫХ МАТЕМАТИЧЕСКИХ ЗАДАЧ.* – URL: www.science-education.ru/ru/article/view?id=24640. (дата обращения: 09.03.2023).

12 - Геофизика: земная кора, океан, атмосфера

Веселова Елизавета Юрьевна, 2 курс
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
Оценка роли аэрозолей в формировании вариаций электрического поля приземной атмосферы по результатам экспедиционных измерений
Петрова Галина Григорьевна, к.ф.-м.н.
e-mail: georgpu@rambler.ru стр. 182

Кондратьева Элина Романовна, 2 курс
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
Влияние влажности воздуха на размерный спектр аэрозолей субмикронного диапазона по результатам экспедиционных измерений
Панчишкина Ирина Николаевна, к.ф.-м.н.
e-mail: ekond@sfedu.ru стр. 184

Корытников Антон Александрович, м.н.с.
Октябрьский, ООО НПФ АМК Горизонт, -
Алгоритм внесения поправок в результаты обработки метода нейтронного каротажа
Ахмадеев Айгиз Ахатович
e-mail: Anton.Korytnikovv@yandex.ru стр. 185

Курпитко Екатерина Евгеньевна, 2 курс
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
Экспериментальные исследования факторов, определяющих перенос зарядов под действием механически сил в приземной атмосфере
Панчишкина Ирина Николаевна, к.ф.-м.н.
e-mail: kurpitko@sfedu.ru стр. 187

Лисовицкий Артем Сергеевич, 1 курс
Владивосток, Дальневосточный федеральный университет, Институт Мирового океана
Фрактальный анализ данных о микродеформациях земной коры в период подготовки землетрясения
Московченко Лариса Григорьевна, к.ф.-м.н.
e-mail: lisoviteckii.as@students.dvfu.ru стр. 188

Милованова Анжелика Александровна, 2 курс
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
Анализ результатов измерений электропроводности приземной атмосферы с учетом влияния радона-222 и аэрозолей
Петрова Галина Григорьевна, к.ф.-м.н.
e-mail: georgpu@rambler.ru стр. 191

Сабирова Аделина Рустамовна, 4 курс
Уфа, Уфимский университет науки и технологий, физико-технический институт
Построение минералогической модели геологического разреза на основе данных ИНГК-С
Вахитова Гузель Ринатовна, к.т.н.
e-mail: adelina.sabirova2018@yandex.ru стр. 192

Шаяхметова Фируза Фариховна, 4 курс
Уфа, Уфимский университет науки и технологий, физико-технический институт
Сравнительный анализ сланцевых толщ
Привалова Ольга Разимовна, к.ф.-м.н.
e-mail: shayakhmetova2002@yandex.ru стр. 193

Оценка роли аэрозолей в формировании вариаций электрического поля приземной атмосферы по результатам экспедиционных измерений

Веселова Елизавета Юрьевна
Милованова Анжелика Александровна
Южный федеральный университет
Петрова Галина Григорьевна
georgpu@rambler.ru

На сегодняшний день не вызывает сомнений, что одним из основных факторов, определяющих электрическое состояние приземного слоя атмосферы, является содержание в атмосфере аэрозольных частиц. Электризация аэрозолей приводит к процессам образования объемных зарядов, которые в свою очередь играют немаловажную роль в формировании вариаций электрического поля в приземном слое атмосферы. Исследование влияния аэрозольных частиц на вариации электрического поля является на данный момент актуальным в анализе данных, которые получены в научных экспедициях лаборатории геофизических исследований Физического факультета Южного федерального университета (ЮФУ). Использование аэрозольных спектрометров, включенных в измерительный комплекс, позволяет на основе большого объема данных получать количественные оценки корреляционной зависимости электрического поля приземной атмосферы от скопления в ней аэрозольных частиц.

В данной работе анализируются результаты измерений в летней экспедиции в августе 2022 года на территории хутора Чернигово-Песчаный Кашарского района Ростовской области, расположенного в засушливой зоне донских степей. Измерения в период экспедиции производились круглосуточно на обширной ровной площадке со скошенным травостоем. Градиент потенциала на уровне земли измерялся с помощью флюксметра «Поле-2» системы ГГО им. А.И.Воейкова. Регистрация концентрации аэрозолей осуществлялась лазерным аэрозольным спектрометром ЛАС-П системы НИФХИ им. Л.Я.Карпова в шести диапазонах: 0,1-0,2; 0,2-0,3; 0,3-0,4; 0,4-0,5; 0,5-0,7; >0,7 мкм. Забор воздуха осуществлялся на высоте 1 метр. Для анализа в этой работе использовались результаты 10-минутных и среднечасовых осреднений всех величин.

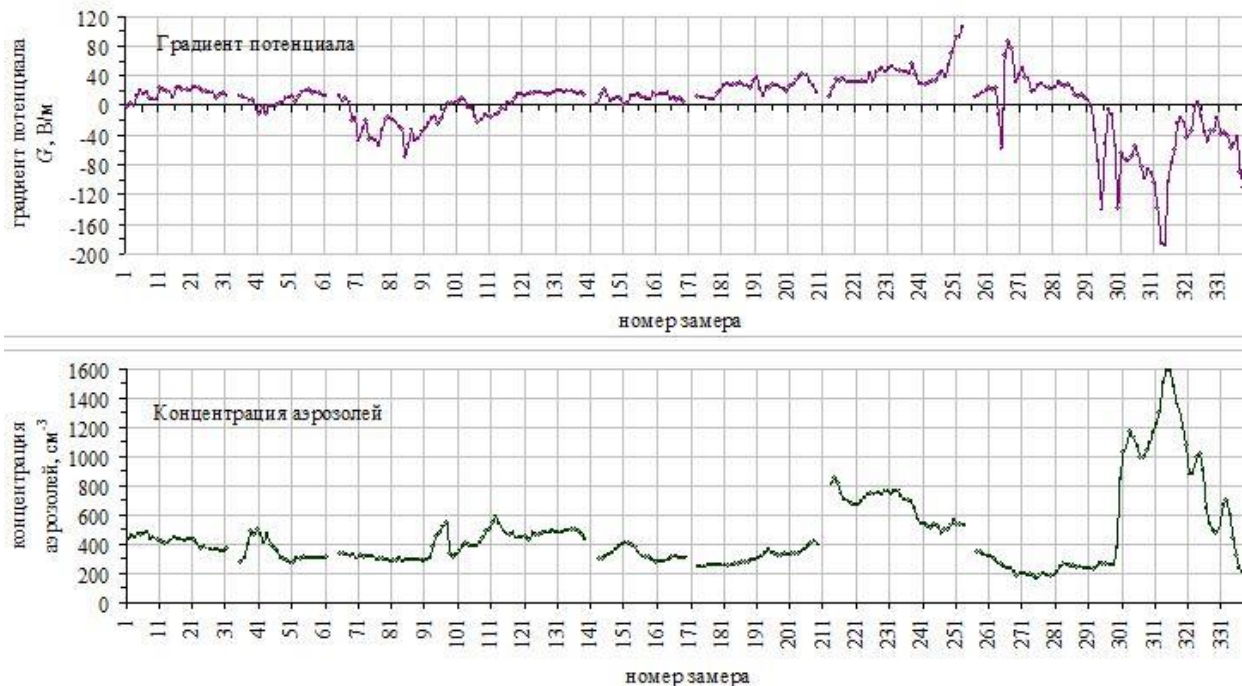


рис. 1. Ряды временной динамики значений градиента электрического поля G и концентрации аэрозолей N ($d > 0,1$ мкм) по 10-минутным осреднениям (Ч.-Песчаный, август 2023, объем выборки 321)

Период измерений характеризовался большим количеством часов жаркой погоды с сильным ветром, способным вызвать поземку, засухой и сухими грозами. В последние дни измерений в регионе наблюдалась пыльная буря, которая в экспедиции отмечалась как наблюдателями визуально, так и фиксировалась приборами. На рисунке 1 пыльная буря хорошо заметна по исключительно высоким концентрациям аэрозолей и отрицательным значениям градиента потенциала в конце периода измерений (точки графиков от 301 до 325). Таким образом, условия в данной экспедиции с точки зрения атмосферного электричества нередко были

возмущенными, что проявлялось в переходах поля через ноль, к появлению низких и отрицательных значений его вблизи земной поверхности.

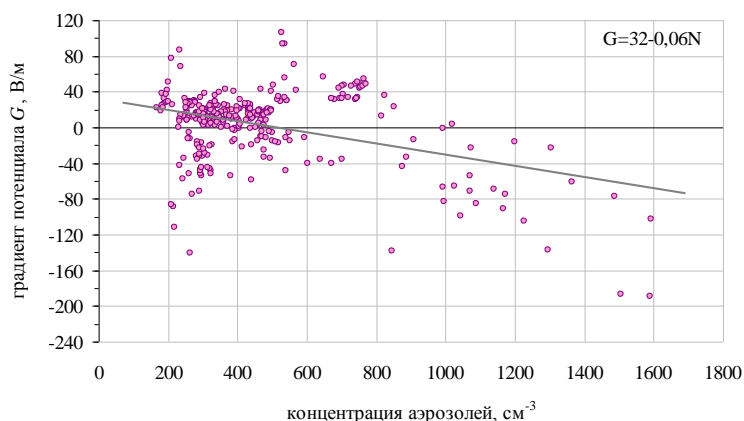


рис.2. Регрессия значений градиента электрического потенциала G по концентрации аэрозолей N ($d > 0,1$ мкм) по 10-минутным осреднениям (Ч.-Песчаный, август 2023, объем выборки 321)

Одной из причин формирования таких вариаций градиента электрического потенциала в засушливый летний период, как показывают исследования, является образование в нижней атмосфере отрицательных объемных зарядов, локализованных на аэрозолях. На это косвенно указывает отрицательная корреляция значений градиента потенциала с концентрацией аэрозолей. В соответствии с уравнением Пуассона для горизонтально – однородной атмосферы при наличии отрицательного объемного заряда градиент потенциала будет уменьшаться с уменьшением высоты, и поле на уровне земли будет пониженным или даже отрицательным:

$$\rho = -\varepsilon_0 \frac{dG_z}{dz}$$

Подтверждением снижения поля с ростом концентрации аэрозолей служит результат корреляционного анализа. Рассчитанное по 10-минутным осреднениям исследуемых величин значение коэффициента корреляции r для всех аэрозолей с размером частиц более 0,1 мкм составило -0,40 (при критическом значении $|r|=0,11$ для $\alpha=5\%$ и объеме выборки более 300). Особенно тесно по результатам полевых измерений значения поля коррелируют с концентрацией самых мелких частиц с диаметром 0,1-0,2 мкм ($r=-0,50$) и наиболее крупных ($r=-0,57$ для 0,7-1,0 мкм и $r=-0,70$ для частиц с диаметром более 1,0 мкм). Концентрация последних возрастает по наблюдениям при сильном ветре, срывающем частицы с поверхности иссушенной почвы. На рисунке 2 представлен эмпирический ряд регрессии значений градиента электрического потенциала вблизи земной поверхности по концентрации аэрозолей всех размерных диапазонов с диаметром частиц более 0,1 мкм. Уравнение линейной регрессии имеет вид $G = 32 - 0,06 \cdot N$. Полученный результат находится в согласии с данными более ранних исследований: в аналогичных условиях в Цимлянске в 2017 году получена зависимость $G = 56 - 0,04 \cdot N$.

Список публикаций:

[1] Petrova G.G., Panchishkina I.N., Petrov A.I., Chkhetiani O.G. // IOP Conference Series: Earth and Environmental Science. Nalchik, Russian Federation. 2021. V.840 <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1755-1315/840/1/012012>

Влияние влажности воздуха на размерный спектр аэрозолей субмикронного диапазона по результатам экспедиционных измерений

Кондратьева Элина Романовна

Курпитко Екатерина Евгеньевна

Южный федеральный университет

Панчишкина Ирина Николаевна, к.ф.-м.н.

georgpu@rambler.ru

Присутствующие в атмосфере аэрозольные частицы как естественного, так и антропогенного происхождения оказывают существенное влияние на свойства атмосферного воздуха. Изучение условий образования аэрозолей и закономерностей их распространения в приземном слое позволяют лучше понимать природу многих явлений в атмосфере. Аэрозольные частицы влияют на радиосвязь, оптические и электрические свойства атмосферного воздуха [1,2]. Изменение прозрачности атмосферы определяет радиационный баланс и, тем самым, обуславливает процессы формирования климата нашей планеты. Учитывая влияние аэрозолей на здоровье человека, мониторинг аэрозольного состояния приземной атмосферы является одной из приоритетных экологических задач.

Многообразие видов аэрозолей пространственно-временная изменчивость их характеристик обусловлена сложным комплексом физико-химических процессов, происходящих в атмосфере. В рамках настоящей работы исследовались вариации счетной концентрации аэрозолей субмикронного диапазона и распределение аэрозольных частиц по размерам по результатам измерений в летних экспедициях в степных засушливых районах Ростовской области и на плато Шаджатмаз на Кисловодской высокогорной научной станции ИФА им. А.М. Обухова РАН (КВНС).

Получены вариационные ряды счетной концентрации аэрозолей и размерные спектры аэрозольных частиц для рассматриваемых периодов измерений. Для оценки возможных причин вариаций концентрации аэрозолей одновременно с измерением концентрации аэрозолей регистрировались метеорологические параметры атмосферного воздуха. В качестве исходных массивов для анализа выбраны ряды ежеминутных значений счетной концентрации аэрозолей субмикронного диапазона (0,1-0,2мкм; 0,2-0,3мкм; 0,3-0,4мкм; 0,4-0,5мкм; 0,5-0,7мкм; 0,7-1,0мкм, >1мкм), полученные с помощью лазерного аэрозольного спектрометра ЛАС-П системы НИФХИ им. Л.Я. Карпова и относительной влажности воздуха, измеренной автоматической метеостанцией М49. Из общего массива данных, полученных в каждом пункте наблюдений, были исключены часы, когда наблюдатели отмечали запах дыма.

Физико-статистический анализ счетной концентрации аэрозолей в пунктах Ростовской области и на плато Шаджатмаз показал, что концентрация аэрозольных частиц всех измеряемых размеров в Цимлянске, на плато Шаджатмаз и в х. Чернигово-Песчаный обнаруживает значительную изменчивость (таблица 1): коэффициенты вариации, рассчитанные для каждого пункта, принимают значения более 30%.

Таблица 1 Статистические характеристики массивов счетной концентрации аэрозоля за период измерений

Пункты наблюдений	Цимлянск	КВНС	х. Чернигово-Песчаный,
	Ростовская обл. 2017 г.	Плато Шаджатмаз 2018г.	Ростовская область 2023 г.
Среднее, см ⁻³	228	432	413
Стандартное отклонение, см ⁻³	103	133	150
Коэффициент вариации, %	45	31	36
Эксцесс	3.0	-0,81	-0,06
Асимметричность	1.3	0,36	0,78
Минимум, см ⁻³	62	97	159
Максимум, см ⁻³	776	828	874
Количество минутных серий измерений	3789	2428	4004

Ранее проведенные исследования показали, что в атмосфере в отсутствие помутняющих факторов, размерные спектры аэрозольных частиц соответствует фоновым значениям с малым содержанием аэрозольных частиц в приземном слое атмосферы [3,4]. С целью изучения влияния содержания водяного пара на численную концентрацию аэрозольных частиц, по результатам измерений построены размерные спектры аэрозолей для различных интервалов относительной влажности воздуха. Характерной особенностью размерного спектра, полученного при высоких значениях влажности, является повышение в 1,5 – 2 раза доли самых мелких аэрозолей (0,1-0,2мкм и 0,2-0,3мкм), по сравнению с измерениями в условиях с низкой влажностью (рис.1). В те

часы, когда наблюдалась влажность более 60 %, концентрация более крупных аэрозолей (более 0,3мкм) оказалась выше в 3 – 4 раза, чем при влажности менее 30 %.

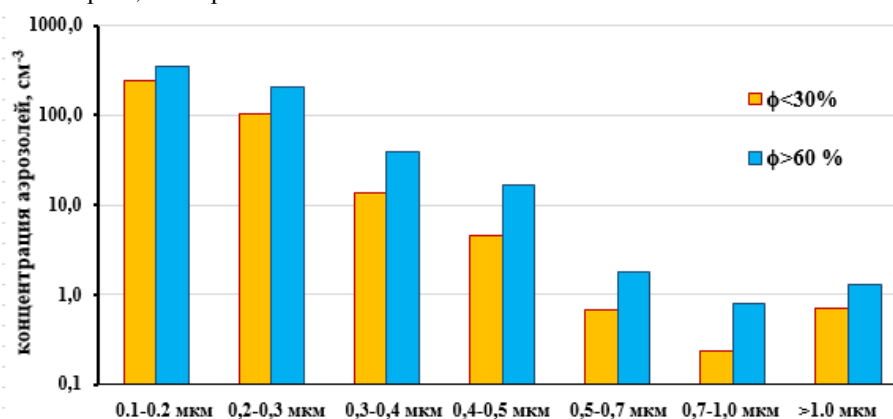


рис.1. Распределение аэрозольных частиц по размерам при различной относительной влажности воздуха
х. Чернигово-Песчаный, Ростовская область, август 2023 г.

Таким образом, согласно результатам измерений, изменение относительной влажности воздуха приводит к трансформации спектра аэрозолей субмикронного размера в сторону увеличения счетной концентрации во всех исследуемых диапазонах. Регрессионная связь счетной концентрации аэрозолей с относительной влажностью воздуха аппроксимируется линейной функцией с высокой степенью достоверности аппроксимации. Полученные закономерности могут быть использованы для разработки более точных модельных представлений о влиянии аэрозоля на свойства атмосферного воздуха.

Список публикаций:

- [1] Petrova G.G. et al. // IOP Conf. Ser.: Earth Environ. Sci. 2021. V.840 012012
- [2] Малиновская Е.А. и др. // Доклады Российской академии наук. Науки о Земле. 2022. Т. 502. № 2. С. 115-124.
- [3] Panchishkina I.N. et al. // IOP Conf. Ser.: Earth Environ. Sci. 2021. V.840 012011
- [4] Смирнов В.В. Ионизация тропосферы. // С.-Петербург: Гидрометеоиздат. – 1992. 310 с.

Алгоритм внесения поправок в результаты обработки метода нейтронного каротажа

Корытников Антон Александрович

Ахмадеев Айгиз Ахатович

ООО НПФ «АМК Горизонт»

Ахмадеев Айгиз Ахатович

anton.korytnikovv@yandex.ru

На основе широко применяемых при обработке метода 2ННКт методических указаний по аппаратуре СРК [1], и экспериментальных исследований, выполненных на метрологических моделях ООО АМК «Горизонт», ПАО НПФ «ВНИИГИС» (г. Октябрьский), и ГУП ЦМИ «Урал-Гео» (г. Уфа), модулем «Горизонт-ННК-90» были разработан настоящий алгоритм, с помощью которого вводится поправка, для уменьшения погрешности показаний прибора в скважине. Основными мешающими геолого-техническими факторами при оценке пористости (водородосодержания) коллекторов в открытом стволе горизонтальных скважин являются: неконтролируемое отклонение зондового устройства модуля 2ННКт от стенки скважины, минерализация и плотность промывочной жидкости (бурового раствора), диаметр скважины.

Учёт влияния этих мешающих факторов на оценку истинных значений пористости, основанный на применении новых алгоритмов обработки показаний большого и малого зондов приведены в данной статье.

$$F(K_{\pi}) = \frac{MЗ}{БЗ} * \frac{БЗ_{\pi}}{MЗ_{\pi}} = \alpha \quad (1)$$

$$F(K_{\pi})_{\text{нов.}} = \alpha - \frac{MЗ_{\text{в}}}{MЗ} * tg_{\text{ср}} \quad (2)$$

Где: K_{π} - коэффициент пористости, МЗ- малый зонд, БЗ- большой зонд, МЗв и БЗв- показания малого и большого зонда в воде, $tg_{\text{ср}}$ - средний тангенс отклонения показаний прибора ННКт, которое появляется с отклонением прибора от стенки скважины и изменением плотности скважинного флюида.

Пример обработки скважинного материала с помощью алгоритма:

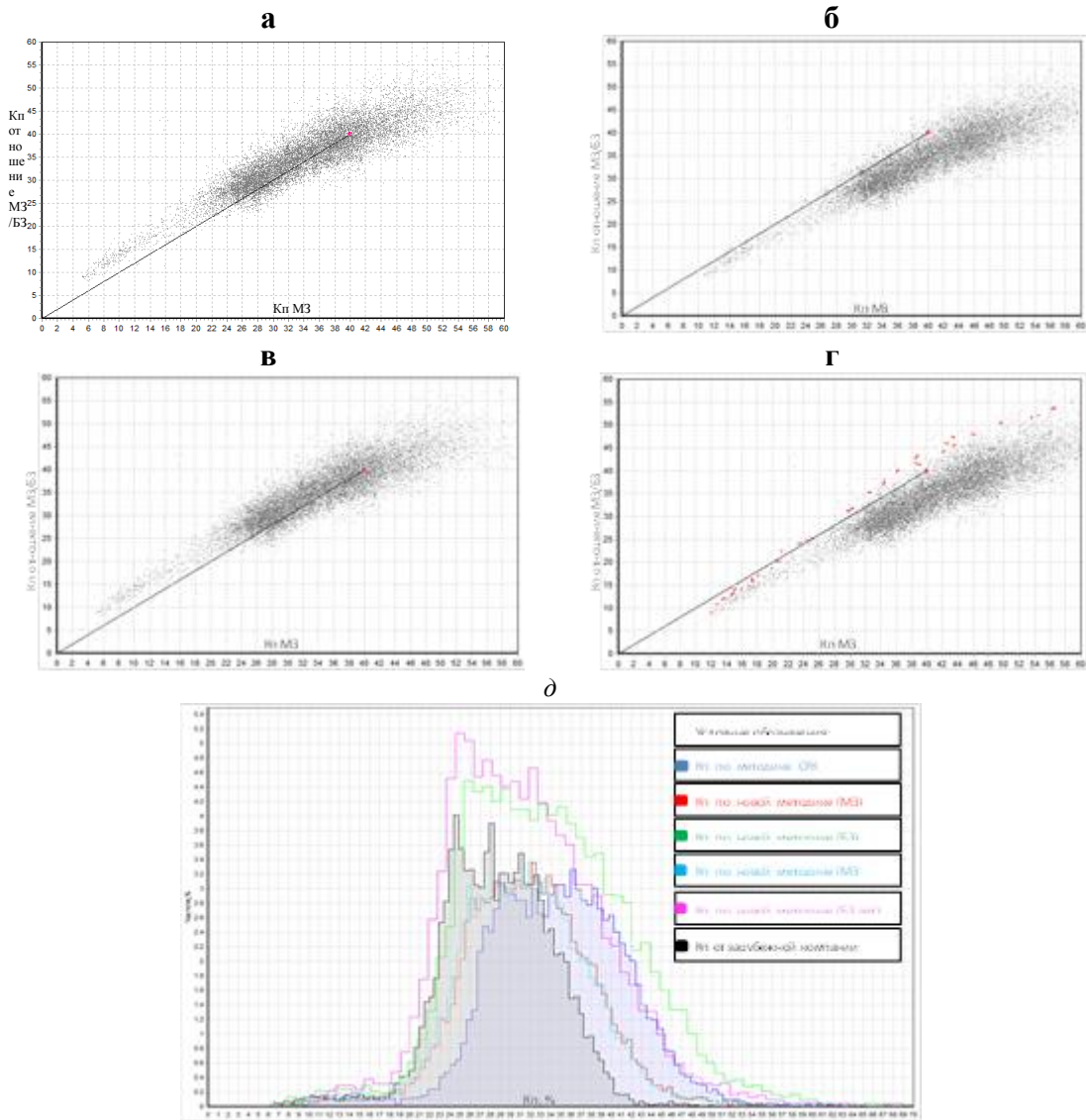


рис.1. – Исходное кросс-плотное распределение по скважине (а, в-М3). Кросс-плотное распределение после корректировки за влияние мешающих геолого-технических факторов (б-М3 ручная обработка; г-М3 автоматизированный модуль); Вероятностное распределение коэффициента пористости, вычисленные по методике СРК и новым методикам (д)

Результат работы алгоритма сопоставим с результатом зарубежной сервисной компании, который брался как эталон в следствии его близости к истинным значениям пористости.

Список публикаций:

- [1] Балапанов М. Х., Куватов З.Х., Корытников А.А // The dielectric constant of the mixture is compensated cholesteric liquid crystals // Актуальные проблемы микро- и нанoeлектроники. г.2018, С. 237.
- [2] Корытников А.А. // Использование СНГК в нефтяных и газовых скважинах с целью улучшения качества скважинного материала // Фундаментальная математика и ее приложения в естествознании: спутник Международной научной конференции «Уфимская осенняя математическая школа-2021» // Тезисы докладов XII Международной школы-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых, посвященной 100-летию профессора БашГУ Фарзтдинова Миркашира Минигалиевича (г. Уфа, 6 – 9 октября 2021 г.)
- [3] Корытников А.А., Кашипов А.И. // Спектрометрия в нефтегазовых скважинах на примере СГК и СНГК // VI всероссийская молодежная научно- практическая конференция // Уфа, г.2021
- [4] Корытников А.А. // Влияние положения автономных приборов в скважине на показания нейтронных методов // ВНКФС-26.2 // Екатеринбург 2022г.

Экспериментальные исследования факторов, определяющих перенос зарядов под действием механически сил в приземной атмосфере

Курнитко Екатерина Евгеньевна

Кондратьева Элина Романовна

Южный федеральный университет

Панчишкина Ирина Николаевна, к.ф.-м.н.

georgpu@rambler.ru

Приземный слой атмосферы представляет собой участок Глобальной электрической цепи, характеризующийся значительной электродинамической вариабельностью даже в невозмущенных условиях. Существенное влияние на электрические процессы в приземной атмосфере оказывает состояние подстилающей поверхности, температурная стратификация и динамический режим. В пунктах Ростовской области в летний период в результате конвективной неустойчивости днем наблюдается интенсивная турбулентность, а для большей части ночных условий характерна устойчивая стратификация, препятствующая вертикальному смещению воздушных масс [1].

При экспедиционных исследованиях атмосферного электричества условия никогда не бывают дважды одними и теми же в связи с изменчивостью факторов, влияющих на атмосферно-электрические характеристики. Для получения закономерностей поведения атмосферно-электрических элементов, которые могут найти применение, необходимо выполнить большое количество измерений в разнообразных состояниях приземного слоя и дать оценку средних значений параметров, характерных для наблюдающихся типичных условий.

Многолетние измерения плотности вертикального тока механического переноса в Ростовской области позволяют сделать некоторые выводы о закономерностях изменения его компонент в различных метеорологических условиях. Вертикальная неоднородность плотности объемного заряда, образующаяся в результате изменения плотности атмосферного вертикального электрического тока проводимости по высоте, приводит к появлению диффузионной и конвективной составляющих вертикального механического переноса заряда в атмосфере и на границе атмосфера-земля.

Настоящая работа является продолжением исследований вариаций плотности тока механического переноса с учетом влияния счетной концентрации аэрозолей субмикронного диапазона и метеорологических условий в пункте наблюдений. Для выявления закономерностей процесса переноса зарядов под действием механических сил необходимо понимание механизмов образования и зарядки аэрозолей. В частности, по мере увеличения относительной влажности воздуха наблюдается рост концентрации аэрозолей [2]. Тот факт, что относительная влажность воздуха влияет на знак заряда, поступающего на земную поверхность в результате механического переноса, согласуется с результатами лабораторных экспериментов Смирнова В.В. [3], которые свидетельствуют о том, что при адсорбции легких ионов аэрозольными частицами по мере увеличения относительной влажности воздуха наблюдается изменение избирательности аэрозолей по отношению к легким ионам разных знаков. Эти процессы приводят к изменению величины и знака объемного заряда в атмосфере и, таким образом, определяют вариации плотности тока механического переноса из атмосферы на землю.

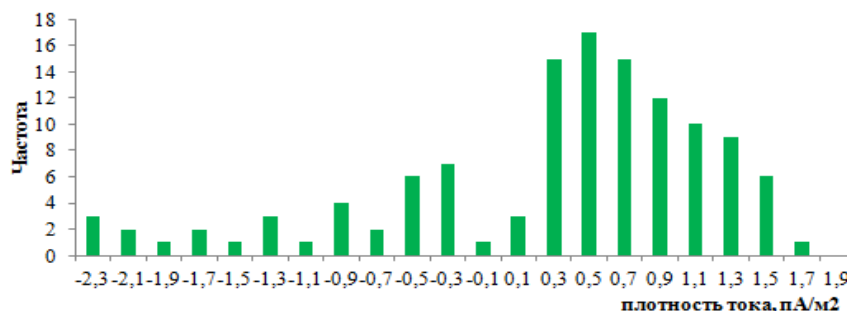


рис.1. Эмпирический ряд распределения плотности тока механического переноса
Цимлянск, август 2017 г.

Так, например, по результатам измерений плотности тока механического переноса в Цимлянске обнаружено, что в часы, когда были зарегистрированы отрицательные значения плотности тока механического переноса относительная влажность воздуха в среднем оказалась равной 24%. Положительный заряд ток механического переноса приносил на землю при средней относительной влажности 41%.

Рассчитаны различные показатели вариации для тока механического переноса из атмосферы на землю. Для количественной оценки изменчивости плотности тока механического переноса на рисунке 1 представлен эмпирический ряд распределения, который обнаруживает положительный эксцесс и левостороннюю

(отрицательную) асимметрию. Причина эксцесса и асимметрии заключается в неоднородности выборки, обусловленной многофакторностью природных процессов.

Таблица 1. Описательная статистика массивов плотность тока механического переноса атмосфера-земля

Пункт наблюдений	Среднее значение, пА/м ²	Стандартное отклонение, пА/м ²	Коэффициент вариации, %	Эксцесс	Асимметрия	Число часовых серий
Цимлянск, 2017 г.	0,20	0,94	470	0,78	-1,13	121

Учитывая многофакторность взаимосвязей между метеорологическими и атмосферно-электрическими процессами, продолжение исследований будет ориентировано на выявление наиболее существенных метеорологических факторов, влияющих на процессы формирования распределения.

Список публикаций:

- [1] Анисимов С. В. и др. // *Фундаментальная и прикладная гидрофизика*, 2016. т. 9, № 4
 [2] Петрова Г.Г. и др. // *Вестник КРАУНЦ. Физ.-мат. науки*. 2018. № 5(25). С. 42-54.
 [3] Смирнов В.В. // *Известия РАН. ФАО*, 2010, том 46, №3, с.321-331

Фрактальный анализ данных о микродеформациях земной коры в период подготовки землетрясения

Лисовицкий Артем Сергеевич

Дальневосточный федеральный университет

Московченко Лариса Григорьевна, к.ф.-м.н.

Lisovitckii.as@students.dvfu.ru

В работе проводится анализ фрактальной размерности временных рядов микродеформаций земной коры, зарегистрированных лазерными деформографами в сейсмически спокойный и сейсмически активный периоды. Данные лазерного деформографа изучаются для выявления долгосрочных эффектов, связанных с изменениями в земной коре в период подготовки тектонического землетрясения. Для анализа используется один из методов фрактального анализа – метод Хигучи.

Земной коре присуще свойство самоорганизованной критичности (СОК), то есть она в своем развитии приходит к такому устойчивому состоянию, для которого характерна фрактальность, когда части объекта подобны целому [3]. Временные ряды микросмещений земной коры отражают это характерное свойство земной коры, что и обуславливает важность исследования их фрактальных характеристик.

Данные брались с трех деформографов Тихоокеанского океанологического института им. В.И Ильичева, расположенных на полигоне «М. Шульца». Принцип работы таких лазерных деформографов основан на методе интерферометрии. Оптическая схема всех лазерных деформографов построена на основе интерферометра Майкельсона [2]. Расположение деформографов выглядит следующим образом: первый из них ориентирован в направлении север-юг и находится на песчаном основании; второй - в направлении запад-восток и находится также на песчаном основании; третий аналогичен первому, но расположен на скальном основании. Для анализа выбраны данные, полученные в спокойный в сейсмическом отношении период 01.11.2020 - 31.01.2021 и активный период 01.01.2022 - 14.03.2022, сразу после которого произошло землетрясение магнитудой 7.3 балла (глубина 41 км, эпицентр в 59 км от Намие, Япония). Полученные данные были обработаны процедурой децимации, а затем подвергнуты специальной фильтрации для удаления сбросов напряжения устройств.

Метод фрактальных длин Хигучи относится к группе методов фрактального анализа, основанных на измерении длины фрактальной кривой. Метод Хигучи подразумевает, что при рассмотрении ряда $Y(j)$, $j=1,2, \dots, N$ для каждого $L(n)$ вычисление выполняется n раз. Длина кривой рассчитывается по точкам, относящимся к моментам $m, m+n, m+2n, \dots$, где $m=1, 2, \dots, n$ — начальное смещение:

$$L_m(n) = \left(\sum_{i=1}^{[(N-m)/n]} Y(m+in) - Y(m+(i-1)n) \right) \frac{N-1}{\left[\frac{N-m}{n} \right]_n} \quad \#(1)$$

Где $\frac{N-1}{[(N-m)/n]_n}$ — нормализующий множитель; $[(N-m)/n]$ — наибольшее целое значение, не превышающее $(N-m)/n$ [1].

Окончательно определяем длину кривой как арифметическое среднее по n значений, каждое из которых есть $L_m(n)$. Затем аппроксимируем эту зависимость прямой линией с помощью метода наименьших квадратов.

Эта прямая описывается уравнением $y = -Dx + b$, где D – искомая фрактальная размерность. Тангенс угла наклона дает нам значение фрактальной размерности по методу Хигучи.

В результате обработки были получены таблицы данных фрактальной размерности, по которым построена серия графиков, описывающих поведение фрактальной размерности временных рядов каждого деформографа в спокойный и активный периоды. На графиках эволюции фрактальной размерности в активный период добавлены даты и энергии произошедших землетрясений. Энергия данных землетрясений была рассчитана по формуле:

$$E = 10^{\frac{3}{2}M + 4.8} \quad \#(2)$$

Где E – энергия землетрясения, Дж; M – магнитуда землетрясений.

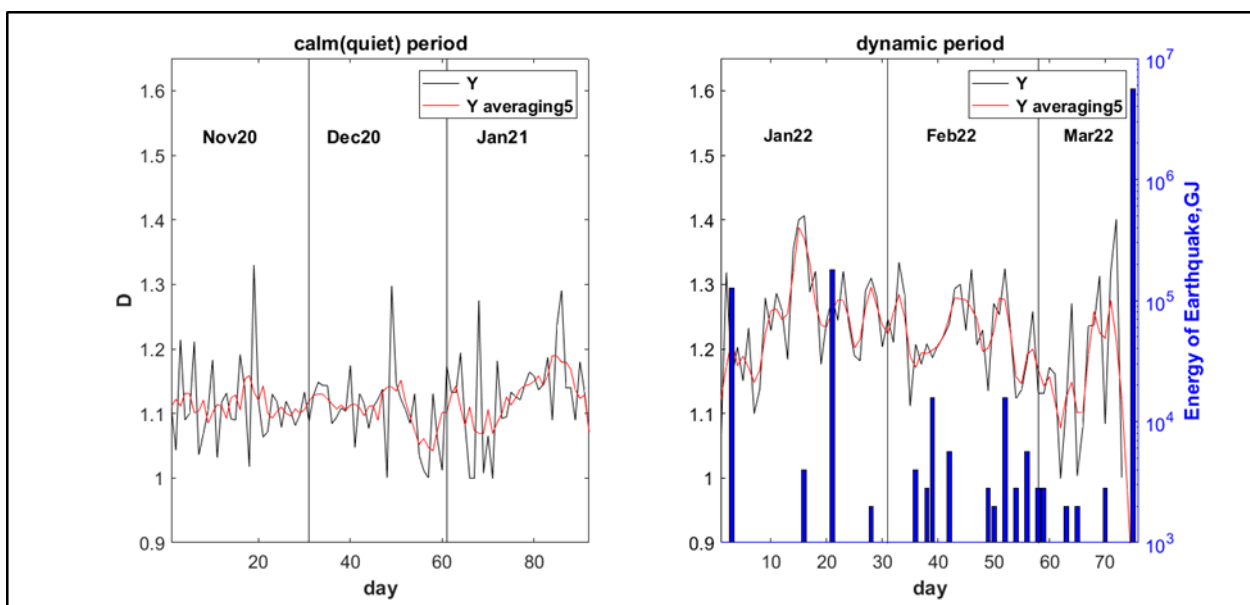


рис 1. Эволюция фрактальной размерности временного ряда первого деформографа в спокойный и активный период

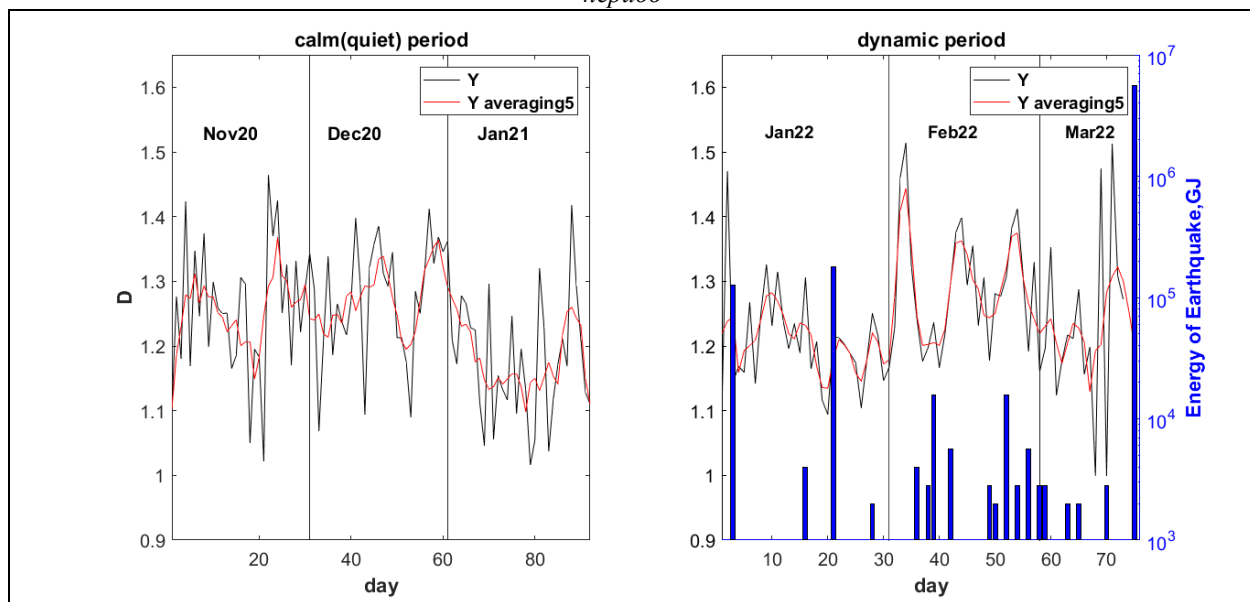


рис 2. Эволюция фрактальной размерности временного ряда второго деформографа в спокойный и активный период

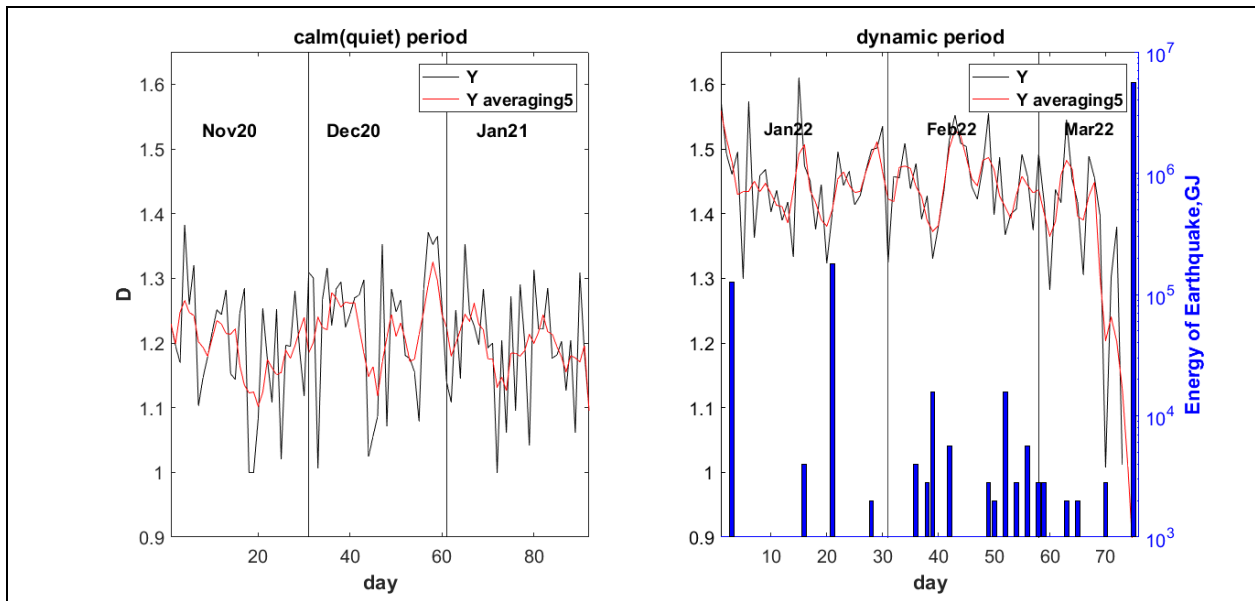


рис 3. Эволюция фрактальной размерности временного ряда третьего деформографа в спокойный и активный период

По результатам исследования были сделаны следующие выводы:

Перед землетрясением магнитудой более 6.0 баллов наблюдаются пики, которые указывают на подготовку системы к переходу в новое состояние ($D \approx 1.5$ и выше). Близкое же к единице значение фрактальной размерности указывает на скорое окончание действующего тренда (рис. 1, 2, 3). Можно заключить, что эволюцию фрактальной характеристики возможно использовать для предварительного прогноза землетрясения с высокой магнитудой.

Сравнительный анализ поведения фрактальной размерности временных рядов первого и третьего деформографа позволяет сделать предположение об усиленной чувствительности скальных пород к распространяющимся микродеформациям земной коры в сравнении с песком. Данный факт наглядно проявляется в сильной изменчивости фрактальной характеристики в активном периоде у третьего деформографа (рис. 3).

Отмечается необычное поведение фрактальной размерности временного ряда второго деформографа (рис.2) в сравнении с первым и третьим. А именно - не наблюдается заметного отличия среднего значения и разброса значений фрактальной размерности в активный и в спокойный периоды.

На данной работе получены данные о поведении фрактальной размерности временных рядов в период предшествующий одному крупному землетрясению магнитудой ≥ 7.0 баллов. Выводы, сделанные на основе этих данных, нуждаются в уточнении, для чего необходимо провести расчеты для больших промежутков времени и изучить большее количество землетрясений. Результаты исследования возможно использовать для увеличения прогностической информации о надвигающихся землетрясениях.

Список публикаций:

- [1] Крылов С. С., Бобров Н.Ю. Фракталы в геофизике // СПб.: Изд-во С.-Петербургского университета, 2004. – 132 с.
- [2] Долгих Г.И, Привалов В. Е. Лазерная физика // Фундаментальные и прикладные исследования. Владивосток: ООО «Рея», 2016. – 352с.
- [3] Bak P., Tang C., Wiesenfeld K. Self-organized criticality // Phys. Rev. B. 1988. –P. 364–374

Анализ результатов измерений электропроводности приземной атмосферы с учетом влияния радона-222 и аэрозолей

Милованова Анжелика Александровна

Веселова Елизавета Юрьевна

Южный федеральный университет

Петрова Галина Григорьевна

georgpu@rambler.ru

Экспериментальные исследования приземной атмосферы осложняются пространственно-временной изменчивостью ее параметров и многофакторностью физических процессов вблизи границы двух сред. Среди факторов, наиболее значимых для формирования вариаций электропроводности атмосферы вблизи земной поверхности, важными являются объемная активность (ОА) радона-222 и концентрация аэрозолей субмикронного диапазона. Именно эти параметры, главным образом, характеризуют интенсивность ионизационно-рекомбинационных процессов, и определяют вариации электропроводности нижней атмосферы.

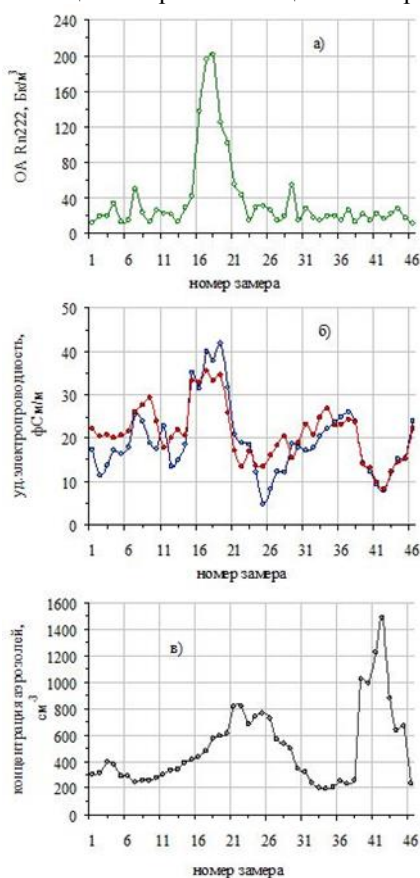


рис.1. Ряды динамики среднечасовых значений:

- а) ОА радона-222;
- б) положительной (красный) и отрицательной (синий) удельных электропроводностей атмосферы;
- в) концентрации аэрозольных частиц $d > 0,1$ мкм

Таким образом, оба фактора, отвечающих за ионообразование и пропадание атмосферных ионов, в совокупности формируют вариации электропроводности атмосферы. Для расчета эмпирического уравнения регрессии удельных электропроводностей по концентрации аэрозолей из массива данных были удалены замеры с ОА радона более 50 Бк/м³.

На рисунке 2 представлены эмпирические ряды регрессии полярных электропроводностей атмосферы по значениям концентрации субмикронных аэрозолей с размером частиц более 0,1 мкм. Экспериментальные данные хорошо аппроксимируются экспоненциальной зависимостью: $\lambda_+ = 24 \cdot e^{-0.0008N}$ ($R^2=0,52$),

Данная работа является продолжением исследований лаборатории геофизических исследований Физического факультета Южного федерального университета (ЮФУ), направленных на установление количественных соотношений между исследуемыми величинами. В научных экспедициях лаборатории удельные полярные электропроводности атмосферы определяются датчиком «Электропроводность-2» ГГО им.А.И.Воейкова. Регистрация концентрации аэрозолей осуществляется лазерным аэрозольным спектрометром ЛАС-П НИФХИ им. Л.Я.Карпова в диапазонах 0,1-0,2; 0,2-0,3; 0,3-0,4; 0,4-0,5; 0,5-0,7; >0,7 мкм. Для измерения ОА радона-222 используется радон-монитор «AlphaGUARD PQ2000 PRO». Летом 2022 года экспедиция была проведена на территории Кашарского района Ростовской области вблизи хутора Чернигово-Песчаный. Измерения производились в августе в течение недели многочасовыми периодами, круглосуточно, с перерывами на профилактику аппаратуры, по погодным условиям и т.д. Для анализа использовались среднечасовые и 10-минутные осреднения характеристик атмосферы. Обширная измерительная площадка, практически лишенная растительности, покрытая стерней, располагалась на степном целинном поле. Забор исследуемого воздуха производился датчиками с уровня 1 метр.

На рисунке 1 представлены ряды динамики исследуемых величин, иллюстрирующие согласованность их синхронных вариаций. Экспедиционный период в этом сезоне характеризовался большим числом часов с очень сильным ветром, как в дневные, так и в ночные часы. Лишь одна ночь оказалась безветренной. В этих условиях поступающий из грунта радон накапливается вблизи земной поверхности, из-за чего такие периоды характеризуются очень высоким содержанием в приземном воздухе α -радиоактивного радона-222, являющегося мощным ионизатором атмосферы (рис.1а, точки 16 - 21). На рисунке видно, что полярные удельные электропроводности в этих условиях существенно возросли (рис.1б). Рост концентрации аэрозолей, адсорбирующих легкие атмосферные ионы, сопровождается, как видно при рассмотрении рисунков 1б и 1в, существенным снижением полярных электропроводностей (точки 22-27 и 39-45).

$\lambda_+ = 28 \cdot e^{-0.0008N}$ ($R^2=0,83$). Расчет выполнен для полярных электропроводностей λ_+ и λ_- , измеряемых в фСм/м, и концентрации аэрозолей N в 10^6 м^{-3} .

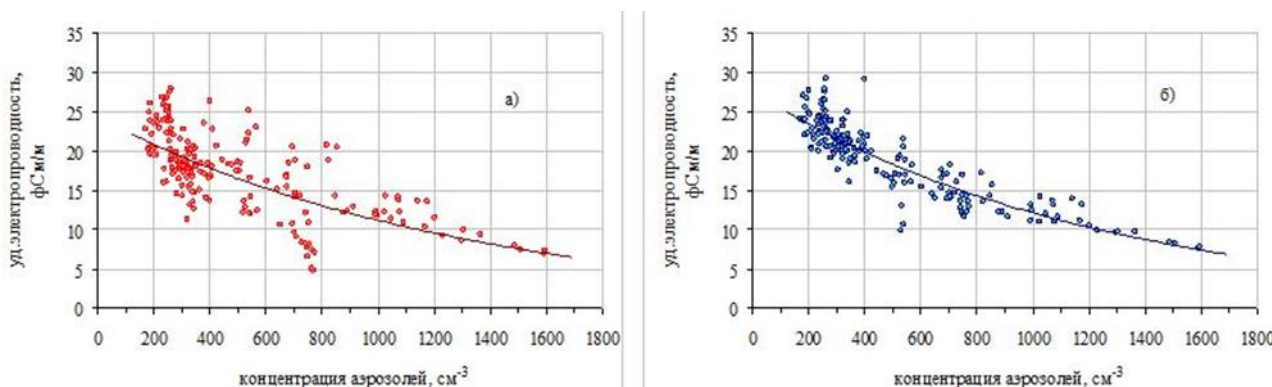


рис.2. Ряды регрессии положительной (а) и отрицательной (б) полярных электропроводностей атмосферы по значениям концентрации аэрозолей с диаметром более 0,1 мкм (10-минутные осреднения, 188 замеров) Ч.-Песчаный, август 2022, высота расположения датчиков 1 метр

В таблице представлены значения коэффициентов корреляции полярных электропроводностей с концентрацией аэрозольных частиц разного размера, рассчитанные на основании результатов измерений экспедиции 2022 года.

Таблица 1. Значения коэффициентов корреляции полярных электропроводностей с концентрацией аэрозольных частиц разного размера

d , мкм	>0.1 (все)	0,1-0,2	0,2-0,3	0,3-0,4	0,4-0,5	0,5-0,7	0,7-1,0	>1.0
λ_+	-0,71	-0,68	-0,70	-0,49	-0,45	-0,44	-0,35	-0,28
λ_-	-0,88	-0,85	-0,84	-0,58	-0,64	-0,73	-0,66	-0,54

Обращает на себя внимание тот факт, что электропроводность сильнее зависит от концентрации более мелких частиц, а отрицательная электропроводность в большей степени реагирует на аэрозоли, чем положительная.

Построение минералогической модели геологического разреза на основе данных ИНГК-С

Сабирова Аделина Рустамовна

Уфимский университет науки и технологий

Вахитова Гузель Ринатовна, к.т.н.

adelina.sabirova2018@yandex.ru

Задача оценки литологии горных пород сложного строения и полиминерального состава на основе интерпретации стандартного комплекса геофизических данных, зарегистрированных в скважинах, является трудной и актуальной. Поэтому в настоящее время для её решения в комплекс ГИС включают специальный метод – импульсный нейтронный гамма-каротаж спектрометрический (ИНГК-С). Он позволяет зарегистрировать гамма-спектры отдельных минералов в составе породы после её облучения потоком быстрых нейтронов и в результате интерпретации получить детальную минеральную модель геологического разреза.

Цель данной работы заключается в построении детальной минералогической модели горных пород на основе скважинных данных.

Усовершенствована методика пересчёта зарегистрированных гамма-спектров в весовые доли химических элементов горных пород, увеличена статистика обработанных данных, выполнены соответствующие расчёты и получена объёмная минеральная модель для двух геологических разрезов. Обработка данных ИНГК-С и расчёты выполнялись в системе ПРАЙМ, разработчиком является кафедра геофизики УУНиТ.

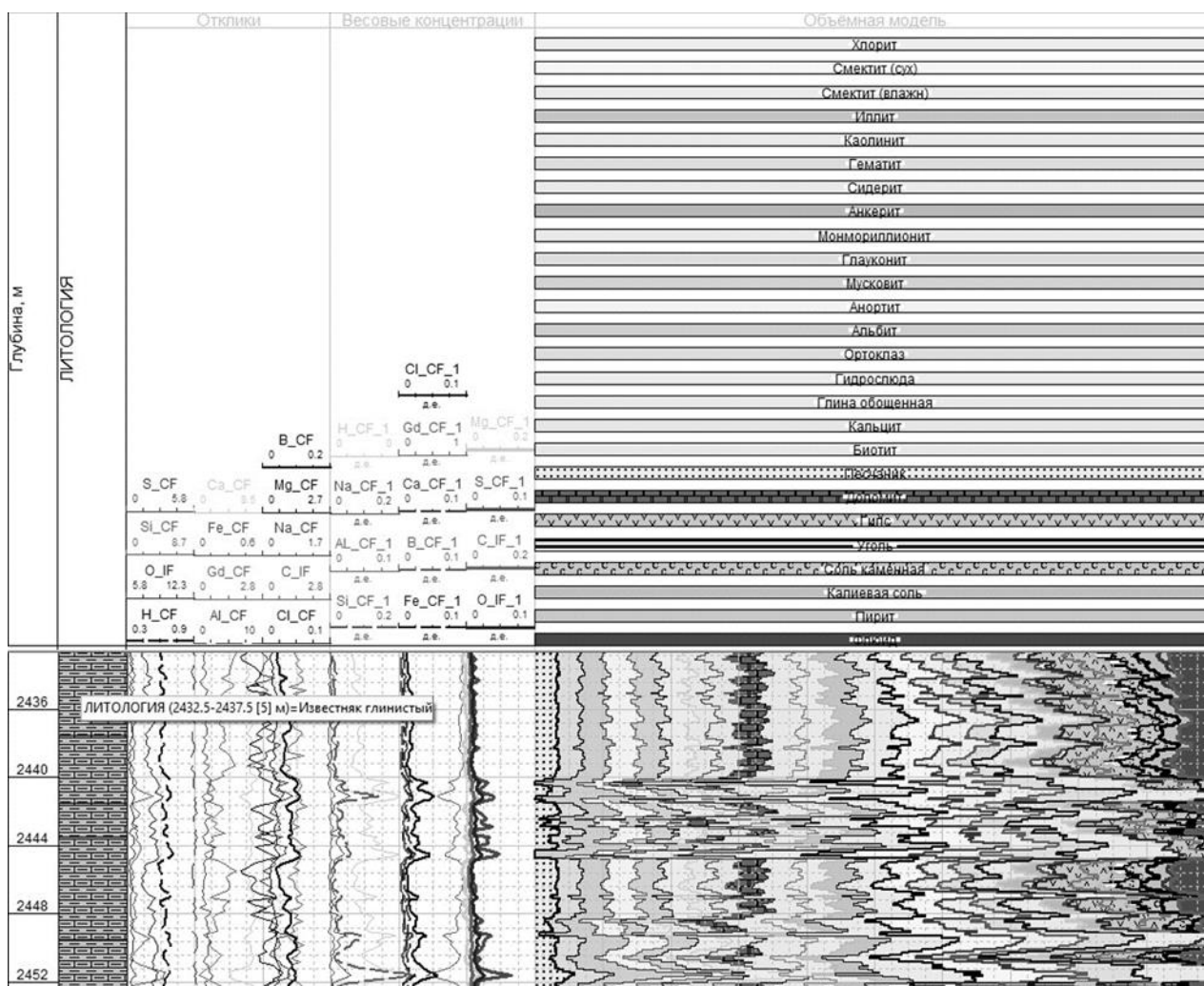


рис.1. Результаты интерпретации ИНГК-С и определения минералогического состава

Полученные результаты имеют важное значение для дальнейшей интерпретации комплекса ГИС. Построенная минеральная модель является основой для внесения поправок при расчёте пористости коллекторов за литологию и детального описания коллекторов.

Список публикаций:

[1] Велижанин В.А. Инструкция по проведению импульсного спектрометрического нейтронного гамма картожа аппаратурой серии АИМС и обработке результатов / В.А. Велижанин, В.С. Бортасевич, Д.Р. Лобода, Т.Е. Меженская, С.Н. Саранцев, В.М. Теленков, Р.Т. Хаматдинов, В.Г. Черменский ("Нефтегазгеофизика"), Н.К. Глебочева (СНГФ), 2004. – 81 с.

[2] Вахитова Г.Р., Шарафутдинов Р.Ф., Бикметова А.Р. Определение минералогического состава сложных коллекторов по результатам интерпретации данных импульсного нейтронного гамма-каротажа спектрометрического // Нефтяное хозяйство. 2021. №8 (выпуск 1174). С. 27-30

Сравнительный анализ сланцевых толщ

Шаяхметова Фируза Фариховна

Уфимский университет науки и технологий

Привалова Ольга Разимовна, ст. преподаватель УУНУТ, ст. эксперт РН-БашНИПИнефть

Shayakhmetova2002@yandex.ru

На фоне прогнозов об истощении традиционных углеводородов все чаще обращают внимание на нетрадиционные. Уже несколько десятков лет Россия изучает и оценивает их. Наиболее перспективным представляется переход к разработке низко- и сверхнизкопроницаемых пород, включая и сланцевые УВ. Этот термин происходит от слова «сланец»-пелитоморфная тонкослоистая терригенная порода, содержащая чешуйки глинистых минералов, а также кварц, кальцит и др. минералы глинисто-алевритовой размерности в

различных соотношениях. Основным признаком является сланцеватость-способность расслаиваться[1]. При содержании органического вещества (ОВ) 3-50% породу называют горючим или нефтяным сланцем, который в определенных условиях способен отдавать нефть. Такими перспективными нефтеносными толщами в России являются следующие свиты: куонамская на Восточно-Сибирской платформе, баженовская в Западной Сибири; хадумская Восточного Предкавказья; менилитовая Предкарпатского прогиба и пиленгская острова Сахалин. В связи с этим, целью работы являлось изучение литологии и коллекторских свойств перечисленных ранее толщ.

В приведенной ниже таблице приведена часть характеристик сланцевых толщ по литологии и ФЕС[2, 3].

Объект	Горизонт	Слой	Литология	Описание	Пористость	Проницаемость	Сорг	Дебит, м ³ /сут	Особенности
Куонамская свита Восточной Сибири	Еркетский	Малокуонамские		Глинистые, серые, волнистослоистые известняки, кремнистые сланцы	Общая-5-30%	0,001-1 мД	0,1-19,5 %	250	Высокое содержание органических веществ, наличие трилобитов, брахиоподов, мелкорачковинных фаун
	Оленекский	Маспакыйские		Глинистые, зеленато-серые известняки					
Пиленгская свита острова Сахалин	Уранайский	Пиленгско-хузинские		Кремнистые аргиллиты и сланцы, песчаники	Общая- 1,7-36% Открытая- 1,5-35% Трещинная- 0,025-2,96%	0,14-202 мД	3,97 %	195-250	Трещинно-поровый тип коллектора в кремнистых отложениях, отрицательный скин-эффект(66,4 %)
	Борский	Пиленгско-Нижнеборские		Кремнистые аргиллиты и сланцы					
	Люкомшинский	Люкомшинско-пиленгская		Углистые породы, сланцы, аргиллиты					
Баженовская свита	Верхнеюрские	Волжский		Аргиллиты темносерые, почти черные, часто литовидные, битуминозные, с прослоями слабо алевролитистых аргиллитов и органогенно-лиштинско-карбонатных пород	Общая 2-5%	Более 0,01мД	Более 20%	200	Высокая радиоактивность пород. Отмечаются остаткифауны-онихиты, раковины двустворок. Присутствуют конкреции, содержащие кальцит или доломит. Текстура слоистая, горизонтальная.



Анализ этих данных в таблице показывает, что наиболее перспективным среди этих сланцевых толщ является баженовская свита. Продуктивные участки характеризуются низкими ФЕС: проницаемость не более 0,01 мкм², пористость 2-3%, иногда встречается 5-8%. Основным отличием является повышенное содержание ОВ, которое составляет более 20%. Добыча нефти характеризуется высокой продуктивностью до 300-500 т³/сут, а иногда до 700 т³/сут.

Хадумская свита существенно менее продуктивна, чем Бажен. Породы, слагающие данную свиту имеют среднюю проницаемость 5 мкм², а пористость варьируется от 0,1 % до 5%, содержание органического вещества более 3%. Если Бажен находится сейчас в промышленном освоении, то для Хадума технологий освоения пока не существует вовсе. Это – практически не тронутый потенциал.

Куонамская свита в восточной части Сибирской платформы близка к баженовской и обладает высоким ресурсным потенциалом. Характеризуется такими коллекторскими свойствами, как пористостью 3-5%, проницаемостью 0,001-1 мкм², содержанием ОВ 4-5% и дебитом до 250 т³/сут. [2]

Таким образом, ближайшие перспективы освоения сланцевой нефти в России больше связаны с колоссальными запасами баженовской свитой Западной Сибири и с куонамской свитой Восточной Сибири, а также интерес представляют и другие рассмотренные толщи.

Список публикаций:

- [1] Калмыков Г.А., Ступакова А.В. // Вестник Московского Университета, сер. 4, Геология, 2015, №3, С. 24
 [2] Яндарбиев Н.Ш., Фадеева Н.П. //Георесурсы. 2017. Спецвыпуск. Ч. 2. С. 208-226
 [3] Конторович А.Э., Меленевский В.Н.// Геология и геофизика. 1998. Т. 39, № 11. С. 1477-149

Фатталова Динара Робертовна, магистрант 1 года обучения

Ижевск, Удмуртский государственный университет, институт математики, информационных технологий и физики

Исследование влияния теплофизической характеристики кавитационного пузырька на пороговые значения ультразвука в процессе 3D печати

Ломаев Степан Леонидович, к.ф.-м.н.

e-mail: w_c_b_and_a@bk.ru

стр. 195

Исследование влияния теплофизической характеристики кавитационного пузырька на пороговые значения ультразвука в процессе 3D печати

Фатталова Динара Робертовна¹

Ломаев Степан Леонидович²

¹*Удмуртский государственный университет*

²*Удмуртский федеральный исследовательский центр Уральского отделения РАН*

Ломаев Степан Леонидович, к.ф.-м.н.

w_c_b_and_a@bk.ru

Управление размерами зернистой структуры металлов - одна из ключевых задач в области металлургии. Один из способов управления структурой - воздействие ультразвука в процессе кристаллизации. Данная технология активно внедряется в литейное дело и позволяет улучшить качество швов при сварке. В настоящее время ведутся активные исследования и разработки внедрения данной технологии в сферу аддитивного производства, иначе - 3D-печати. [1]

Одна из гипотез, объясняющих измельчение зеренной структуры металла при воздействии ультразвуковой волны - ультразвуковая кавитация [2]. Под действием растягивающих давлений жидкость разрывается и образуется парогазовый пузырек. При наступлении сужающего давления кавитационный пузырек сжимается и схлопывается. При схлопывании локально возрастают давление и температура, и, если схлопывание произошло вблизи кристаллизующегося металла, зерно разбивается на более мелкое.

Динамику поведения парогазового пузырька в сферическом приближении описывает формула Нолтинга-Неппайреса:

$$R\ddot{R} + \frac{3}{2}\dot{R}^2 = \frac{1}{\rho} \left(\left(P_h + \frac{2\sigma}{R_e} - P_v \right) \left(\frac{R_e}{R} \right)^{3\gamma} - \frac{2\sigma}{R} - 4\eta \frac{\dot{R}}{R} - (P_h - P_a (-\sin \omega_a t)) \right) \quad (1)$$

где R - радиус пузырька, R_e - радиус пузырька без воздействия ультразвука, γ - показатель политропы, P_h - давление насыщенных паров, P_a - амплитуда акустического давления, P_v - статическое давление в жидкости, ω_a - акустическая угловая частота.

Существует два режима схлопывания - резонансный и безрезонансный. Для первого случая существует частота УЗ, при которой давление, оказываемое ультразвуком, существенно меньше, чем в случае, где резонанса нет. В зависимости от состава пузырька, процесс, проходящий над ним, различен, следовательно, показатель политропы в различных ситуациях различается. Возникает вопрос о влиянии показателя политропы на такие пороговые характеристики, как акустическое давление и частота ультразвука, необходимых для схлопывания кавитационных пузырьков.

Расчеты проводились для пузырьков, радиусы которых равны 10^{-5} м, 10^{-6} м и 10^{-7} м. Изменение радиуса с течением времени представлены на *рис. 1*.

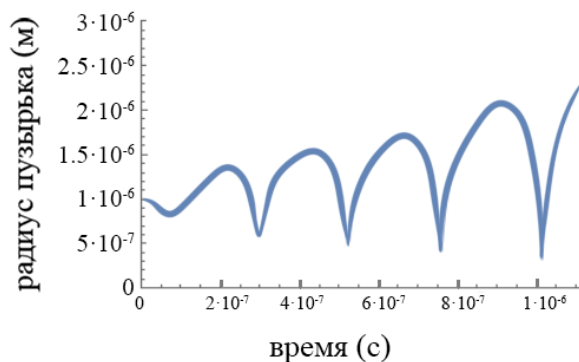


рис.1. Изменение радиуса кавитационного пузырька с течением времени в резонансном режиме

На рис. 2 представлены зависимости акустического давления и частоты от показателя политропы для пузырька с радиусом 10^{-6} м в резонансном режиме.

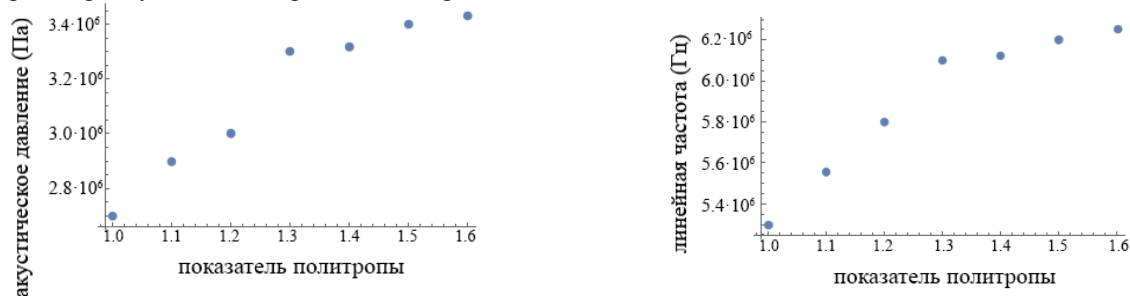


рис.2. Зависимость акустического давления (а) и линейной частоты УЗ (б) от показателя политропы в резонансном режиме

Анализируя рисунки, можно сделать вывод, что при росте показателя политропы увеличиваются и пороговые характеристики акустического давления и частоты УЗ, необходимого для схлопывания кавитационных пузырьков. Похожие результаты получены и для пузырьков с радиусами 10^{-5} м и 10^{-7} м. Пороговые значения ультразвука, необходимые для активации кавитации (для пузырьков, радиус которых 10^{-6} м): частота УЗ $\approx 3.8 \cdot 10^6$ Гц, акустическое давление $\approx 1.1 \cdot 10^6$ Па.

При изменении показателя политропы, связанного прежде всего с химическим составом пузырька, значения пороговых характеристик УЗ увеличиваются примерно в два раза. Отсюда можно сделать вывод: при подаче УЗ в процессе печати необходимо учитывать теплофизический фактор в виде показателя политропы.

Список публикаций:

- [1] Ivanov I. A. et al. Effect of laser-induced ultrasound treatment on material structure in laser surface treatment for selective laser melting applications //Scientific Reports. - 2021. - Т. 11. - №. 1. - С. 23501.
- [2] Todaro C. J. et al. Grain structure control during metal 3D printing by high-intensity ultrasound //Nature communications. – 2020. – Т. 11. – №. 1. – С. 1-9.

14 - Статистическая механика жидкости, газа и плазмы. Молекулярная физика

Габышев Дмитрий Николаевич, н.с.

Тюмень, Тюменский государственный университет, институт экологической и сельскохозяйственной биологии

Дополнения к расчету скорости конденсационного роста микрокапель воды

e-mail: gabyshev-dmitrij@rambler.ru стр. 198

Дополнения к расчету скорости конденсационного роста микрокапель воды

Габышев Дмитрий Николаевич

Тюменский государственный университет

gabyshv-dmitrij@rambler.ru

При расчете скорости конденсационного роста капли воды принято опираться на классическую работу Дж. Максвелла [1]. Подробнее этот вопрос разбирался Н.А. Фуксом [2]. В простейшей модели сферическая капля находится в неограниченном пространстве, заполненном воздухом при постоянной температуре и влажности. Площадь поверхности $S(t)$ такой капли, как оказывается, растёт с постоянной скоростью $dS/dt = \text{const}$, в связи с чем производную \dot{S} принято называть скоростью конденсационного роста капли. Указанная модель роста капли претерпела множество модификаций для того или иного случая, в частности, когда капля мала и её размер сопоставим с длиной свободного пробега молекул в воздухе [3]. Хотелось бы отметить одну, по-видимому, не замеченную прежде деталь: исходное выражение (2.3) в [2] для массового потока конденсата I с учётом стефановского течения остаётся аналитически интегрируемым, даже если выражение эффективного коэффициента диффузии D_{eff} в знаменателе учитывает кинетический режим транспорта молекул [2, 3]:

$$D_{eff} = \frac{D}{R/(R+\lambda) + D/(R\alpha\langle v \rangle)}, \quad (1)$$

где R — текущий радиус капли, D — обычный коэффициент диффузии водяного пара в воздухе при данной температуре, $\langle \lambda \rangle$ — длина свободного пробега молекулы водяного пара в воздухе, которая по величине близка к толщине слоя Кнудсена, окружающего каплю, $\langle v \rangle$ — четверть средней скорости молекул водяного пара, α — коэффициент конденсации, равный для воды около 0.04 и представляющий собою вероятность того, что молекула, движущаяся к поверхности конденсированной фазы, не отразится от неё [4]. После преобразования выражения массового потока I , интегрирования его по радиусу R и подстановки пределов интегрирования, как указано в [2], получаем выражение, которым определяется связь радиуса капли R со временем t :

$$\frac{D\Delta c}{\rho}(t - t_0) = F(R) - F(R_0) + \frac{D}{2\alpha\langle v \rangle}(R - R_0), \quad (2)$$

где ρ — плотность воды, Δc — разница абсолютной влажности вблизи и на отдалении от капли, имеющая простейший вид $c_0 - c_\infty$, когда стефановское течение мало (при комнатной температуре), R_0 — начальный радиус капли в момент t_0 , в качестве которого может выступать радиус ядра конденсации или масштаб неоднородности при гетерогенной и гомогенной нуклеации, соответственно. Для удобства тут же обозначено громоздкое выражение, возникающее при интегрировании:

$$F(R) \equiv \frac{R^2}{3} \ln \left[\left(1 + \frac{\langle \lambda \rangle}{R} \right)^{\frac{R}{\langle \lambda \rangle}} \right] + \frac{R\langle \lambda \rangle}{3} \ln \left[\left(1 + \frac{R}{\langle \lambda \rangle} \right)^{\frac{\langle \lambda \rangle}{R}} \right] + \frac{R^2}{6} - \frac{R\langle \lambda \rangle}{3}. \quad (3)$$

Выражение (3) играет роль на малых масштабах, приводя к тому, что малая капля растёт медленнее, чем большая, причём функция (2), однозначно сопоставляющая каждому значению радиуса R свой момент времени $t(R)$, записывается аналитически точно. Сгруппировав в (2) слагаемые с R^2 , можно явно ввести площадь $S = 4\pi R^2$. После дифференцирования получаем выражение для скорости \dot{S} :

$$\dot{S} = \frac{8\pi D\Delta c}{\rho} - \frac{8\pi}{3} \frac{\langle \lambda \rangle^2}{R+\langle \lambda \rangle} - 8\pi \left(\frac{D}{2\alpha\langle v \rangle} - \frac{\langle \lambda \rangle}{3} \right) \dot{R}. \quad (4)$$

В нём присутствует производная \dot{R} , которая выражается из (2) с помощью аппарата обратных функций:

$$\frac{dR}{dt} = \frac{D\Delta c}{\rho} \left\{ \frac{4R}{3} + \frac{D}{2\alpha\langle v \rangle} \right\}^{-1}. \quad (5)$$

Отсюда следует, что скорость роста (4) является функцией только радиуса $\dot{S}(R)$. Радиус же связан со временем через уравнение (2). Таким образом, (2) и (4) образуют систему уравнений с двумя неизвестными t и \dot{S} , где R выступает связующим параметром. На это и хотелось указать в настоящих тезисах. Отметим, что фактор $D/2\alpha\langle v \rangle$ в (4) довольно мал, и для жидкой воды 0...100°C при атмосферном давлении он меняется монотонно в диапазоне 1.9...2.9 мкм. Когда капля становится велика $\langle \lambda \rangle/R \rightarrow 0$, при $R \gg D/2\alpha\langle v \rangle$ выражения (1)-(5) приводят к обычному классическому случаю крупной капли, изложенному в монографии [2].

Второй момент, который хотелось бы осветить, это особенность влияния электрического поля на скорость конденсационного роста капли. То, что такое влияние существует, не вызывает никаких сомнений [5, 6]. В недавних работах [7, 8] расчётная молекулярно-кинетическая модель сопоставлялась с экспериментальными данными по каплям в левитирующем состоянии. Два основных вывода работ [7, 8] гласили следующее. Во-первых, абсолютная скорость роста капель во влажном воздухе тем больше, чем

сильнее напряжённость электрического поля E , причём эта зависимость линейная. Во-вторых, чем выше температура, тем ниже относительный вклад электро-конденсации в рост капли, поскольку с температурой возрастает хаотическое движение молекулярных диполей. Покажем, что к тем же выводам можно прийти из простых рассуждений. Опираясь станем на термодинамический подход, основы которого изложены в известном учебнике [9]. Максимум свободной энергии Гиббса $\partial G / \partial R = 0$ даёт выражение для влажности вблизи искривлённой поверхности (известное уравнение Томсона-Кельвина). В работе [10] при вычислении энергии Гиббса было предложено учитывать двойной электрический слой, окружающий каплю, и её заряд. В работе [11] говорится, что если имеется внешнее электрическое поле, то энергия Гиббса должна включать в себя его плотность энергии. Строго говоря, нужно учитывать также, что капля воды во внешнем электрическом поле поляризуется, и плотность энергии оказывается различной в разных точках поверхности капли [12], поэтому для расчета энергии Гиббса необходимо интегрирование локальных значений по всем точкам поверхности. Однако здесь мы пренебрежём поляризацией капли для улучшения наглядности. Типичный собственный заряд микрокапли радиусом ~ 10 мкм составляет несколько сотен элементарных зарядов [12] и на поверхности капли создаёт напряжённость на 2-3 порядка ниже, чем наличествует внутри кучево-дождевых облаков (~ 100 кВ/м). В связи с этим собственным зарядом капли можно пренебречь. Наконец, пренебрежём капиллярным членом $2\sigma / R$ в формуле Кельвина (σ — коэффициент поверхностного натяжения), что возможно, если выбрать достаточно крупную каплю. В конечном итоге формула Кельвина примет вид

$$\ln \frac{c_0}{c_\infty} = - \frac{M}{RT\rho} \frac{\varepsilon_0}{2} \left(E + \frac{\zeta}{\delta} \right)^2. \quad (6)$$

где M — молярная масса водяного пара, T — абсолютная температура, ε_0 — электрическая постоянная, $\zeta = 0.3$ В — электрокинетический потенциал в диффузионном слое, окружающем каплю, δ — толщина диффузионного слоя (превышает толщину слоя Штерна, который состоит из нескольких молекулярных слоёв). Напряжённость в диффузионном слое намного выше, чем внешнее поле $\zeta/\delta \gg E$, поэтому можно приближённо записать:

$$\frac{\Delta c}{c_\infty} \approx - \frac{\varepsilon_0}{2} \frac{M}{RT\rho} \left(\frac{\zeta}{\delta} \right)^2 \left[1 + 2E \frac{\delta}{\zeta} \right]. \quad (7)$$

Из выражения (7) напрямую видна прямая пропорциональная зависимость поправки к концентрации Δc от напряжённости E и обратная пропорциональная зависимость от абсолютной температуры T , замеченные в [7, 8]:

$$\Delta c \propto E, \quad \Delta c \propto \frac{1}{T}. \quad (8)$$

Неожиданный факт связи эффективной влажности воздуха с величиной электрического поля был замечен в работе [5], где авторы обратили внимание на связь интенсивности зародышеобразования с напряжённостью электрического поля, которое понижало критический радиус зародыша. В принципе, подобно электрическому полю, к изменению скорости роста должно вести наличие растворённого в воде вещества, например, соли [13, 14]. Математически это выражается поправкой Рауля в теории Кёлера [15], которая, когда мала, приводит к линейной зависимости парциального давления водяного пара от концентрации растворённого вещества.

Таким образом, многие факторы могут влиять на скорость конденсационного роста капли. Здесь предложены две поправки: первая играет роль при малых размерах капель, а вторая работает, когда имеется достаточно сильное внешнее поле. Поведение обеих поправок согласуется с тенденциями, наблюдаемыми в предшествующих исследованиях [3, 5, 8].

Исследование при поддержке Совета по грантам Президента Российской Федерации (МК-332.2022.1.2) и Министерства науки и высшего образования РФ (FEWZ-2023-0002).

Список публикаций:

- [1] Фукс Н.А. *Испарение и рост капель в газообразной среде*. Москва: Изд-во АН СССР, 1958.
- [2] Maxwell J.C. *Theory of the Wet Bulb Thermometer*. Sci. Papers of J. C. Maxwell. Cambridge: University Press., 1890. V. 2. P. 636.
- [3] Jakubczyk D. et al. // *Acta Physica Polonica A*. 2012. V. 122. No. 4. P. 709. DOI: 10.12693/APhysPolA.122.709
- [4] Козырев А.В., Ситников А.Г. // *УФН*. 2001. Т. 171. №7. С. 765. DOI: 10.3367/UFNr.0171.200107c.0765
- [5] Singh N., Kumar A. // *Indian J. Radio & Space Phys.* 2003. V. 32. P. 379.
- [6] Singh N., Singh D. // *Indian J. Radio & Space Phys.* 2004. V. 33. P. 43.
- [7] Gabyshev D.N. et al. // *J. Aerosol Sci.* 2019. V. 135. P. 103. DOI: 10.1016/j.jaerosci.2019.06.002
- [8] Gabyshev D.N. et al. // *Aerosol Sci. Technol.* 2020. V. 54. P. 1556. DOI: 10.1080/02786826.2020.1804522
- [9] Леонтович М.А. *Введение в термодинамику. Статистическая физика*. Наука: Москва, 1983. С. 136–140.
- [10] Das Gupta N.N., Ghosh S.K. // *Rev. Mod. Phys.* 1946. V. 18. P. 225. DOI: 10.1103/RevModPhys.18.225
- [11] Butt H.-J. et al. // *Phys. Rev. E*. 2011. V. 83. P. 061604. DOI: 10.1103/PhysRevE.83.061604
- [12] Pruppacher H.R., Klett J.D. *Microphysics of clouds and precipitation*. Springer, 2010. P. 799.
- [13] Maruyama Y., Hasegawa K. // *RSC Adv.* 2020. V. 10. P. 1870. DOI: 10.1039/C9RA09395H
- [14] Fedorets A.A. et al. // *Int. J. Thermal Sci.* 2023. V. 188. P. 108222. DOI: 10.1016/j.ijthermalsci.2023.108222
- [15] Köhler, H. // *Trans. Faraday Soc.* 1936. V. 32. P. 1152. DOI: 10.1039/TF9363201152

15 - Механика. Теоретическая механика. Механика жидкости, газа и плазмы. Инженерная механика

Асылкаев Артур Марселевич, 3 курс
Новосибирск, Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, физический
Исследования ударно-волнового сжатия с использованием синхротронного излучения
Константин Алексеевич Тен, к.ф.-м.н.
e-mail: a.asylkaev@gsu.ru стр. 204

Афанасьев Михаил Олегович, 4 курс
Уфа, Уфимский университет науки и технологий, Институт авиационных технологий и материалов
Изучение механизма адсорбции и структуры микроэмульсии
Замула Юрий Сергеевич
e-mail: afaninho5@mail.ru стр. 205

Аюпов Артур Русланович, 4 курс
Уфа, Уфимский университет науки и технологий, физико-технический институт
Экспериментальное исследование вынужденной конвекции эмульсионной системы в канале прямоугольного сечения
Мусин Айрат Ахматович, к.ф.-м.н.
e-mail: aupov195@gmail.com стр. 206

Булатова Айгузель Загировна, магистрант 2 года обучения
Уфа, Уфимский университет науки и технологий, физико-технический институт
Численное изучение течений вязкой жидкости в микроканалах с тупиковыми порами
Солнышкина Ольга Александровна, к.ф.-м.н.
e-mail: bulatova29@yandex.ru стр. 207

Валиуллина Вилен Ильшатовна, аспирант 2 года обучения
Уфа, Уфимский университет науки и технологий, физико-технологический институт
Экспериментальное исследование и математическое моделирование течения суспензий в прямоугольном канале
Ковалева Лиана Ароновна, д.т.н.
e-mail: vilenches@gmail.com стр. 208

Галеев Рушан Ринатович, магистрант 1 года обучения
Уфа, Уфимский университет науки и технологий, физико-технический институт
Экспериментальное изучение динамики капель воды в эмульсии под действием неоднородного электрического поля при гидродинамическом потоке
e-mail: galeevr93@gmail.com стр. 210

Гарифуллин Искандар Шамилевич, магистрант 1 года обучения
Уфа, Уфимский университет науки и технологий, физико-технический институт
Разработка микрофлюидной платформы для изучения мобилизации остаточной нефти
Батыршин Эдуард Сафаргалиевич, к.ф.-м.н.
e-mail: is@bgutmo.ru стр. 211

Карачурин Артур Ибрагимович, 4 курс
Уфа, Уфимский университет науки и технологий, физико-технический институт
Влияние осаждения механической примеси на поток флюидов в стволе скважины
Закиров Марат Финатович, к.т.н.
e-mail: karachurin95@bk.ru стр. 212

Каримова Гульназ Римовна, 3 курс
Уфа, Институт механики им. Р.Р. Мавлютова Уфимского федерального исследовательского центра РАН
Отражение и преломление косой волны на границе раздела «вода-песок, насыщенный водой или газогидратом»
Галиакбарова Эмилия Вильевна, д.ф.-м.н.
e-mail: gulnazkar69@gmail.com стр. 213

Мамаева Зилия Зайтовна, 4 курс
Уфа, Институт механики им. Р.Р. Мавлютова Уфимского федерального исследовательского центра РАН
Диагностика коллекторских характеристик призабойной зоны скважины по динамике собственных колебаний столба жидкости в НКТ
Башмаков Рустэм Абдрауфович, к.ф.-м.н.
e-mail: zilia16@mail.ru стр. 214

Мухарямова Гульшат Ильдаровна, молодой ученый
Уфа, Уфимский университет науки и технологий, Физико-технический институт
Электромагнитное воздействие как один из методов улучшения реологических свойств нефтей
Ковалева Лиана Ароновна, д.т.н.
e-mail: gulshat-karimova-1993@mail.ru стр. 215

Мухутдинова Айгуль Айратовна, инженер-исследователь
Уфа, Уфимский федеральный исследовательский центр РАН
Численное исследование течения вязких жидкостей в каналах кольцевого типа
Урманчеев Саид Федорович, д.ф.-м.н.
e-mail: muhutdinova18@gmail.com стр. 216

Сафиуллин Аскар Русланович, 4 курс
Уфа, Уфимский университет науки и технологий, информатики и робототехники
Исследование характеристик акустической волны в зависимости от параметров среды
Галимзянов Марат Назипович, к.ф.-м.н.
e-mail: safiullinak@mail.ru стр. 217

Фазлетдинов Спартак Уралович, магистрант 1 года обучения
Уфа, Уфимский университет науки и технологий, физико-технический институт
Численное моделирование заземления нефти в поросетевых микромоделях
Питюк Юлия Айратовна, к.ф.-м.н.
e-mail: spartak.fazlet@gmail.com стр. 219

Фарвазов Ленар Эрикович, 4 курс
Уфа, Уфимский университет науки и технологий, физико-технический институт
Экспериментальное исследование фильтрации различных нефтей в модели пористой среды
Зиннатуллин Расул Рашитович, к.т.н.
e-mail: farvazovlenar@gmail.com стр. 220

Фаткуллина Назгуль Байтулловна, магистрант 2 года обучения
Уфа, Уфимский университет науки и технологий, физико-технический институт
Численное изучение особенностей течения жидкости в микромоделю пористой среды
Солнышкина Ольга Александровна, к.ф.-м.н.
e-mail: nazgulbay@mail.ru стр. 222

Фаттахов Салават Радикович, 4 курс
Уфа, Уфимский университет науки и технологий, информатики и робототехники
Исследование динамики волн давления в канале с пузырьковым кластером
Галимзянов Марат Назипович, к.ф.-м.н.
e-mail: salavat232001232001@mail.ru стр. 223

Фатхуллин Артур Ильсурович, магистрант 1 года обучения
Челябинск, Челябинский государственный университет, физический
Сравнение методов расчета движения твердого тела
Замоздра С. Н., к.ф.-м.н.
e-mail: trickster.arthurr@gmail.com стр. 224

Фахретдинова Алсу Леонидовна, 4 курс
Уфа, Уфимский университет науки и технологий, физико-технический институт
Моделирование движения деформируемых частиц в областях с детерминированным боковым смещением
Солнышкина Ольга Александровна, к.ф.-м.н.
e-mail: A.L.Fakhretdinova@yandex.ru стр. 226

Юсупова Рушана Усмановна, 3 курс
Уфа, Институт механики им. Р.Р. Мавлютова Уфимского федерального исследовательского центра РАН
Динамика волн давления в жидкости, содержащей пузырьковую зону полусферической формы
Галимзянов Марат Назипович, к.ф.-м.н.
e-mail: rabota_ru333@mail.ru стр. 227

Исследования ударно-волнового сжатия с использованием синхротронного излучения

Асылкаев Артур Марселевич

Новосибирский национальный исследовательский государственный университет

Константин Алексеевич Тен, к.ф.-м.н.

a.asylkaev@g.nsu.ru

Для получения больших параметров вещества в экстремальных условиях (при высоких давлениях и температурах) часто используется ударно-волновое сжатие с использованием взрывчатых веществ (ВВ). В таких условиях требуется проведение измерений за очень короткий промежуток времени (доли микросекунд).

В данной работе определение параметров вещества при ударном нагружении основано на измерении проходящего синхротронного излучения (СИ) от ускорителя на встречных электрон-позитронных пучках (ВЭПП-4). Когда излучение проходит через объект исследования, часть излучения поглощается самим объектом. Прошедшее излучение несет информацию о распределении массы сжатого вещества объекта. Ударное сжатие вещества проводилось взрывом цилиндрических зарядов на основе ВВ ТАТБ (Триаминотринитробензол) диаметром 40 мм.

СИ возникает при движении электронов с ускорением по орбите накопительного кольца синхротрона. СИ может быть как вредным, так как оно приводит к потере энергии пучка, так и полезным, так как оно дает возможность использовать СИ для исследования внутренней структуры вещества [1]. Увеличить интенсивность СИ можно путем использования специальных устройств, в которых увеличивается локальная индукция магнитного поля. Основным типом таких устройств является вигглеры (змейки).

В настоящий момент на накопительном кольце ускорителя ВЭПП-4 стоит девяти-полюсный вигглер с магнитной индукцией 2 Тл. Благодаря удивительным свойствам СИ стало возможным осуществлять измерения в быстропротекающих (в том числе взрывных) процессах с малыми экспозициями (менее 1 нс). Время между импульсами СИ определяется размерами ускорителя и числом банчей (сгустков электронов), и на ВЭПП-4 составляет 200-1200 нс.

Для изучения динамических экспериментов с использованием СИ необходим детектор, позволяющий измерять проходящее излучение за время, которое меньше, чем интервал между соседними импульсами СИ [2]. В наших опытах для регистрации проходящего излучения используется рентгеновский детектор DIMEX. Он представляет из себя ионизационную камеру (с рабочим газом – ксенон) с электронным усилителем, отделяющим область конверсии рентгеновских фотонов от промежутка, в котором заряд собирается на считывающую полосковую структуру.

В процессе ударного волнового сжатия и последующей разгрузки меняется плотность вещества вдоль СИ, а значит, меняется и спектр поглощения. Чтобы вычислить массу сжатого вещества (в нашем случае пенопласта), была проведена калибровка поглощения детектора DIMEX. Для этого ставилась масса того же вещества перед детектором, все каналы DIMEX при этом калибровались одновременно. Интенсивность, которую детектор зарегистрировал перед проведением эксперимента, можно записать как

$I_{before} = I_0 \exp(-\alpha_1 m_0 + \alpha_2 m_0^2)$, где I_0 – начальный поток СИ, m_0 – начальная масса (до ударного сжатия) вещества вдоль луча СИ, α_1, α_2 – интерполированные коэффициенты поглощения. Аналогично можно записать

$\ln \frac{I_{exp}}{I_{before}} = g = -\alpha_1 (m_x - m_0) + \alpha_2 (m_x - m_0)^2$, где m_x – масса вещества вдоль луча. Откуда можно получить квадратное уравнение для $\frac{m_x}{m_0}$.

Массив масс m_x , вычисленных для каждого канала детектора, составляет распределение массы пенопласта за фронтом ударной волны.

В эксперименте с помощью данной методики было измерено относительное изменение интенсивности вдоль оси пенопласта после сжатия сильной ударной волны (Рис. 1). Благодаря калибровке можно восстановить массу сжатого вещества вдоль СИ. Предложенный метод позволяет сквозным образом получить динамику плотности вещества после сильного ударного сжатия, то есть получить уравнение состояния вещества, с помощью которого можно проводить компьютерное моделирование.

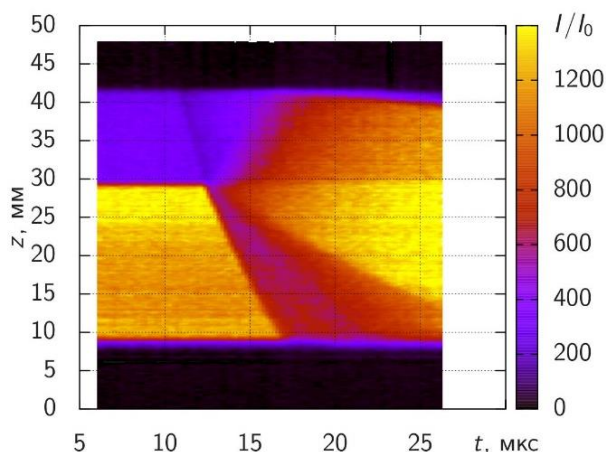


рис.1. Распределение интенсивности при ударном сжатии пенопласта

Список публикаций:

- [1] Серый А., Серая Е. Изобретая инструменты науки будущего. Ускоряющая науку ТРИЗ //М.: Едиториал УРСС. – 2016. – С. 45.
- [2] Титов В. М., Тен К. А., Пруэлл Э. Р., Толочко Б. П., Лукьянчиков Л. А., Мерзиевский Л. А., Жуланов В. В., Шехтман Л. И. Опыт применения синхротронного излучения для исследования детонационных процессов //Физика горения и взрыва. – 2011. – Т. 47. – №. 6. – С. 6.

Изучение механизма адсорбции и структуры микроэмульсии

Афанасьев Михаил Олегович

Замула Юрий Сергеевич, Батыриин Эдуард Сафаргалиевич, Питюк Юлия Айратовна

Уфимский университет науки и технологий

Замула Юрий Сергеевич

afaninho5@mail.ru

Микроэмульсии (МЭ) – это термодинамически устойчивые микрогетерогенные системы, образованные несмешивающимися жидкостями в присутствии мицеллообразующих ПАВ [1]. Микроэмульсии нашли широкое распространение в пищевой и нефтегазовой промышленности, фармацевтике, синтезе наночастиц и др. [2]. В некоторых случаях необходимо присутствие дополнительного ПАВ (соПАВ) для образования микроэмульсии. Характерный размер капель в таких системах составляет 10-100 нм. Микроэмульсии оптически прозрачные или слабо опалесцирующие жидкости.

В данной работе для приготовления микроэмульсии были использованы анионный ПАВ – додецилсульфат натрия и соПАВ – н-бутанол. В качестве масляной фазы использовался н-гептан. Водная фаза представляла собой 4% (по массе) водный раствор NaCl [3]. Эксперименты проводились при комнатной температуре 25°C.

Практическая часть состояла в следующем: Очистка поверхности происходила путем расщепления слюды с помощью липкой ленты (скотча), при этом образовывалась поверхность, имеющая отрицательный заряд высокой плотности. Далее на свежеччищенную пластинку слюды наносилась МЭ с помощью дозатора. После адсорбции на поверхность слюды в течение 1 минуты образец промывался водой Milli-Q, остатки воды выдувались сжатым воздухом и высушивались при 105°C в течение 20 минут.

Эксперименты по изучению структуры МЭ проводились на АСМ Agilent 5500AFM в полуконтактном режиме кантилевером NSG30 (TipsNano), радиус кривизны острия <10 нм. Размер скана 5×5 мкм с разрешением 256×256 точек.

Для подтверждения адсорбции микроэмульсии предварительно были получены следующие топографии поверхностей подложек слюды: подложки слюды после очистки с помощью скотча; после ополаскивания деионизированной водой; после нанесения и смывки раствора ПАВ/соПАВ в воде. При этом изменений в топографии поверхности не наблюдалось.

Результаты сканирования поверхности слюды после нанесения микроэмульсии с различным процентным содержанием компонентов при постоянном процентном содержании ПАВ/соПАВ представлены на рис.1.

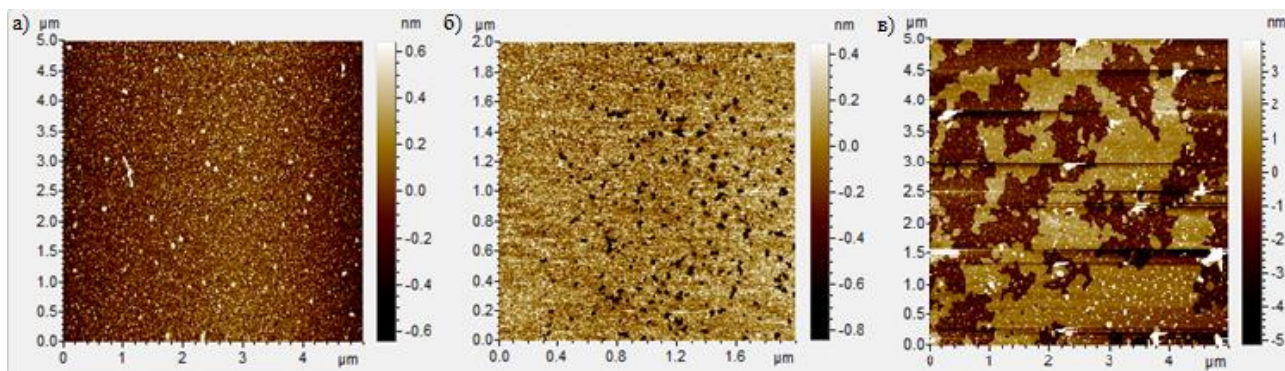


рис.1 АСМ топографии поверхности слюды после взаимодействия с МЭ с одинаковым процентным содержанием ПАВ. ПАВ+соПАВ/гептан/рассол: а) 57,33/4,76/37,90; б) 57,33/19,05/23,62; в) 57,33/26,19/16,48

На полученных топографиях поверхностей можно наблюдать качественные различия в структуре. В зависимости от состава микроэмульсии могут наблюдаться следующие характерные картины: локализованные углубления, отдельные частицы, а также сложные структуры с развитой морфологией. В дальнейшем планируется изучение реологических характеристик микроэмульсий, изучение структуры адсорбционного слоя при добавлении наночастиц в микроэмульсии.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта No 21-79-10212.

Список публикаций:

- [1] Миттел К. Л., Мукерджи П., Принс Л. М. и др // Мицеллообразование, солюбилизация и микроэмульсии / Ред. К. Миттел. - М. : Мир, 1980. - 597 с.
 [2] Holmberg K. et al. // Polymers in aqueous solution. – New York : Wiley-Blackwell, 2002.
 [3] Bellocq A. M. et al. Three—dimensional phase diagram of the brine-toluene-butanol-sodium dodecyl sulfate system //Journal of Colloid and Interface Science. 1980. V. 74. No. 2. P. 311-321.

Экспериментальное исследование вынужденной конвекции эмульсионной системы в канале прямоугольного сечения

Аюпов Артур Русланович

Валиуллина Вилена Ильшатовна, Мусин Айрат Ахматович

Уфимский университет науки и технологий

Ковалева Лиана Ароновна

aupov195@gmail.com

За последние десятилетия наблюдается большой интерес к изучению конвективных течений. Этот обусловлено тем, что процессы тепломассопереноса играют важную роль в природе и технике. В частности, стоит выделить такое явление, как вынужденная конвекция. Данный процесс зачастую используется в различных системах, таких как оптимизация поверхности аппаратов для улучшения тепломассопереноса, канал охлаждения, ядерная энергетическая система. Также следует отметить, что вынужденная конвекция имеет место и в нефтяной промышленности, а именно при транспортировке и перекачке нефти [1].

В настоящей работе был исследован процесс возникновения и развития вихревого потока эмульсионной системы в прямоугольном канале при вынужденной конвекции. Экспериментальное исследование проводилось на специально построенной лабораторной установке (рис. 1). Основным элементом установки являлась ячейка прямоугольного сечения, имеющая отверстие для заполнения внутренней полости жидкостью, а также два отверстия для слива. Приток и отток эмульсии происходил при помощи двух шприцевых насосов. Объектом исследования являлась модельная эмульсия типа «вода в масле», стабилизированная поверхностно-активным веществом Span80 [2]. Дисперсионной средой было выбрано вазелиновое масло. Процесс течения дисперсной системы в ячейке фиксировался на фотокамеру каждые 10 с. Обработка и анализ полученных данных производились методом PIV (Particle Image Velocimetry).



рис.1. Схема экспериментальной установки

В самом начале изображения были подвержены предварительной обработке, состоящей из гамма-коррекции: настройки яркости и контрастности, и выполнении бинаризации. Позже устанавливалась интересующая система координат и проводилась пост-обработка. Заключительным этапом была кросскорреляционная очистка. В результате исследования были получены мгновенные поля скорости при различных расходах жидкости, по которым были рассчитаны статистические характеристики потока жидкости: средняя скорость и отдельные ее компоненты, значения завихренности. Установлено, что все параметры увеличивают свое значение пропорционально увеличению расхода жидкости.

Исследование поддержано РФФ №19-11-00298.

Список публикаций:

- [1]. Lindstedt M., Karvinen R. Optimization of isothermal plate fin arrays with laminar forced convection //Journal of Enhanced Heat Transfer. – 2012. – Т. 19. – №. 6.
 [2]. Valiullina V. I. et al. Experimental study of the stratification of polydisperse emulsions in a cell with heated walls //Journal of Physics: Conference Series. – IOP Publishing, 2021. – Т. 2057. – №. 1. – С. 012041.

Численное изучение течений вязкой жидкости в микроканалах с тупиковыми порами

Булатова Айгузель Загировна

Фаткуллина Назгуль Байтулловна

Уфимский университет науки и технологий

Солнышкина О.А., к.ф.-м.н.

bulatova29@yandex.ru

Развитие технологий микрофлюидных систем привело к пониманию особенностей течения жидкости в микромасштабе. Как правило, основными компонентами микроустройств являются микроканалы, в которых поток жидкости происходит за счет градиента давления. Области применения таких систем включают нефтяную промышленность, медицину и фармацевтику, биохимию, авионику и робототехнику и др. Поэтому прогнозирование поведения потоков жидкостей и описание их режима течения в микроустройствах, в которых используются такие структуры, является важной задачей для определения характеристик многофазных процессов в таких отраслях.

Данная работа посвящена численному исследованию гидродинамических потоков в микроканале с тупиковыми порами – неровностями на стенках каналов. Рассматривается периодическое течение вязкой несжимаемой жидкости внутри плоского канала прямоугольного поперечного сечения. Предполагается, что течение жидкости достаточно медленное ($Re \ll 1$), что позволяет пренебречь инерционными членами в расчетах. Таким образом, динамика данной системы описывается уравнениями Стокса. На стенках канала скорость потока равна нулю. Все процессы рассматриваются при изотермических условиях и без учета межмолекулярных сил Ван-дер-Ваальса. Более подробное описание математической постановки задачи можно в работе [1].

Численный подход основан на методе граничных элементов (МГЭ), ускоренного как за счет высокоэффективного масштабируемого алгоритма FMM, так и за счет использования гетерогенных вычислительных архитектур (многоядерные CPU и графические процессоры) [2]. Алгоритм ускоренного МГЭ позволяет проводить расчеты в областях со сложной геометрией с высокой дискретизацией поверхности. Предложенный подход впервые был успешно применен в работе [3] для изучения течений в микроканалах произвольных форм.

В ходе исследования была разработана качественная триангуляция микроканалов с неровностями в форме квадрата и равностороннего треугольника (рис. 1.). Поверхность каждого канала покрывалась треугольной сеткой с количеством расчетных узлов N_{Δ} от 30640 до 84928 в зависимости от сложности канала.

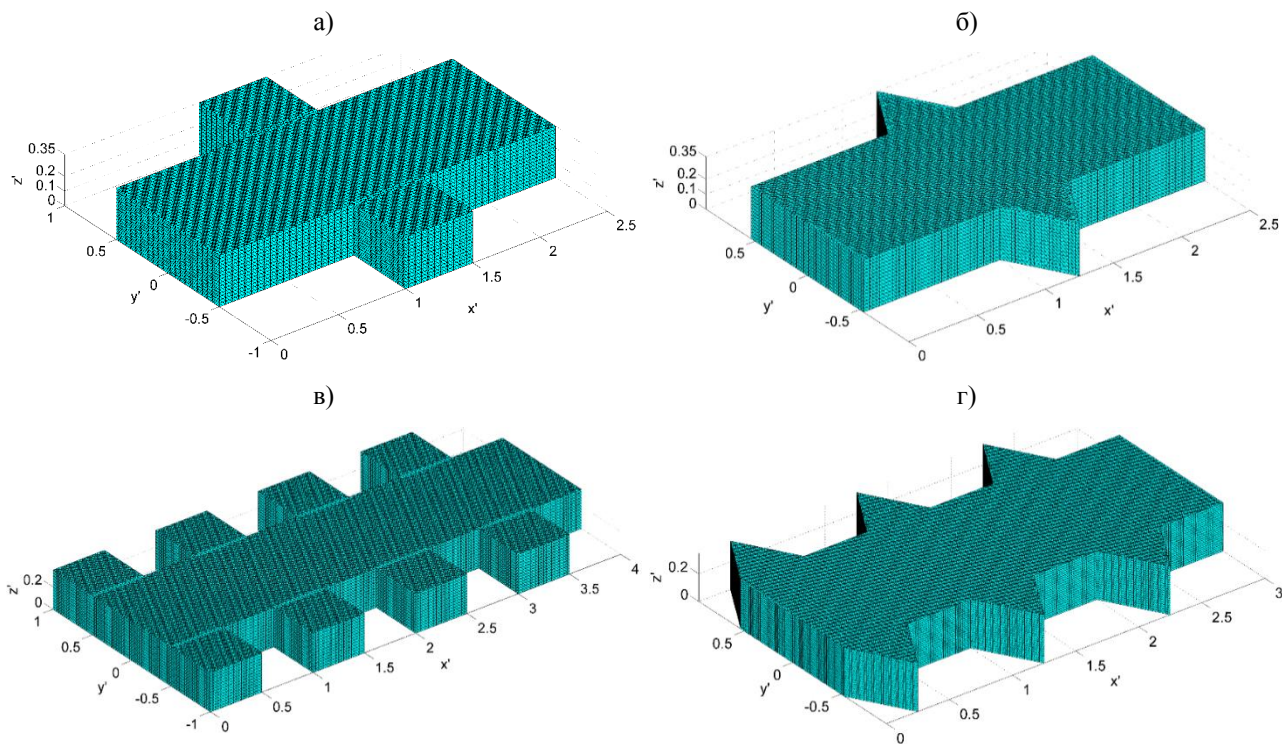


рис.1. Триангуляция каналов с неровностями в виде квадрата и равностороннего треугольника. Количество узлов сетки: а) $N_{\Delta} = 32524$, б) $N_{\Delta} = 30640$, в) $N_{\Delta} = 58256$, г) $N_{\Delta} = 84928$.

Исследовалось влияние размера, формы неровностей на характеристики потока при течении вязкой несжимаемой жидкости. Была визуализирована картина потока, а также рассчитаны продольная и поперечная компоненты скорости по длине фрагмента каналов. Также были получены профили скорости в плоскости yz для узкой и широкой части каналов и профили скорости вдоль длины канала (в плоскости xz) при изменении расстояния до стенок. Показано, что геометрия и форма значительно влияют на структуру потока внутри микроканала. Результаты данных исследований важны при изучении динамики дисперсных систем в моделях пористых сред, а также при оценке эффективности захвата и сортировки частиц в микрофлюидных устройствах.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ в рамках научного проекта № 21-79-10212.

Список публикаций:

- [1] Solnyshkina O.A., Fatkullina N.B., Bulatova A.Z. // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2020. V. 1675. P. 012099.
- [2] Абрамова О.А., Иткулова Ю.А., Гумеров Н.А., Ахатов И.Ш. // *Вычислительные методы и программирование.* 2013. Т. 14. С. 438-450.
- [3] Itkulova Y.A., Solnyshkina O.A., Gumerov N.A. // *Proc. of ASME 2012 International Mechanical Engineering Congress and Exposition.* 2012. V. 7. P. 873-881.

Экспериментальное исследование и математическое моделирование течения суспензий в прямоугольном канале

Валиуллина Вилена Ильшатовна

Юлмухаметова Регина Рафисовна, Аюпов Артур Русланович, Мусин Айрат Ахматович

Уфимский университет науки и технологий

Ковалева Лиана Ароновна

valiullina.vilena@mail.ru

Течение дисперсных систем в каналах разной геометрии играет важную роль в природных и промышленных процессах, например, суспензии широко используются в фармацевтической, пищевой отраслях и т.д. Немаловажную роль они занимают и в нефтяной отрасли при применении одной из популярных технологий повышения нефтеотдачи – гидравлический разрыв пласта, который заключается в закачке жидкости под высоким давлением, с последующим раскрытием естественных и образованием искусственных трещин. Для расклинивания трещин закачивается песчано-жидкостная смесь (жидкость переноса и проппант) [1].

Несмотря на популярность данной тематики, существует ряд вопросов, требующих дальнейших экспериментальных исследований и численного моделирования [2, 3].

В данной работе исследуется течение суспензии в плоском вертикальном канале прямоугольной формы методами экспериментального и численного моделирования. Экспериментальное исследование суспензии проводилось на специально построенной лабораторной установке, основным элементом которой является экспериментальная ячейка, представляющая собой вертикальный прямоугольный канал с отверстиями для перекачки жидкости. Приток и отток осуществлялся с помощью двух шприцевых насосов. Объектом исследования являлась модельная суспензия. В качестве дисперсионной среды было использовано вазелиновое масло, диспергированной фазой являлись твердые сферические частицы. Геометрические характеристики этих частиц были определены с помощью оптического микроскопа Olympus IX71, а полученные изображения обработаны с помощью программного обеспечения ImageJ и Matlab. Процесс течения дисперсной системы в ячейке фиксировался на фотокамеру каждые 10 с. Обработка и анализ полученных данных производились методом PIV (Particle Image Velocimetry).

Математическая модель процесса построена в одножидкостном приближении и включает уравнение неразрывности для суспензии, систему уравнений движения суспензии и уравнение сохранения массы объемной концентрации частиц. Считается, что жидкость несжимаема, сферические частицы одного размера. Система уравнений решается методом контрольного объема в трехмерной постановке в программном комплексе OpenFOAM. На рис. 1 представлены графики стационарного распределения концентрации твердых частиц в канале шириной 2 мм при перепадах давления 20 кПа и 40 кПа. Видно, что с уменьшением перепада давления наблюдается увеличение объемной концентрации частиц, которые осели вдоль канала. При заданных значениях перепада давления скорость течения жидкости соизмерима со скоростью оседания частиц, поэтому в этом случае они успевают осесть вдоль канала.

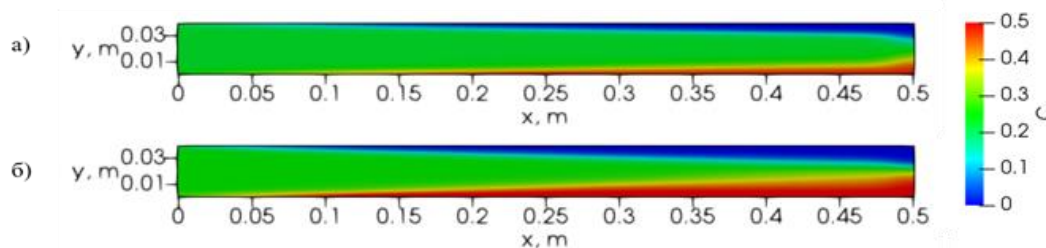


рис.1. Распределение концентрации частиц в канале при перепадах давления 40 (а) и 20 кПа (б).

Получены экспериментальные результаты исследования движения суспензии в условиях вынужденной конвекции в прямоугольной ячейке. Анализ полученных данных показал, что форма потоков меняется в зависимости от скорости течения жидкости через конвективную ячейку, которая задается перепадом давления. Проведено численное исследование динамики распределения частиц в потоке и осаждения по длине канала в зависимости от значений скорости закачки суспензии. Полученные результаты могут быть использованы для проведения оценочных вычислений продвижения фронта частиц в зависимости от скорости нагнетания суспензии.

Список публикаций:

- [1]. Аксаков А.В., Борицук О.С., Желтова И.С., Дедурин А.В., Калуджер З., Пестриков А.В., Торопов К.В. Корпоративный симулятор гидроразрыва пласта: от математической модели к программной реализации // Нефтяное хозяйство. — 2016. — №11. — С. 35-40.
- [2]. Замула Ю.С., Валиуллина В.И., Мусин А.А., Ковалева Л.А. Экспериментальное моделирование динамики осаждения твердых сферических частиц, диспергированных в вязкой жидкости // Вестник Башкирского университета. — 2019. — Т. 24. — №. 4. — С. 794-798.
- [3]. Юлмухаметова Р. Р., Мусин А. А., Валиуллина В. И., Ковалева Л. А. Математическое моделирование течения суспензии в системе пересекающихся трещин // Сибирский журнал индустриальной математики. — 2023. — Т. 26. — № 1. — С. 201–211.

Экспериментальное изучение динамики капель воды в эмульсии под действием неоднородного электрического поля при гидродинамическом потоке

Галеев Рушан Ринатович

Муллаянов Альмир Ильфирович, Мусин Айрат Ахматович

Уфимский университет науки и технологий

Ковалева Лиана Ароновна

galeevr93@gmail.com

Одним из эффективных методов деэмульсации является использование электрического поля разной частоты. Работы по разделению эмульсий с применением электромагнитного воздействия связаны с термическим воздействием на водную фазу. При этом воздействие в низкочастотном диапазоне связано с возникновением диэлектрофоретической силы, заставляющей капли воды перемещаться в области более высокой напряженности электрического поля, создавая тем самым условия для более успешного расслоения эмульсии на отдельные фазы[1].

Для изучения динамики капель эмульсии под действием неоднородного электрического поля при наличии гидродинамического потока была создана экспериментальная установка на базе оптического микроскопа Olympus IX71, с интегрированной высокоскоростной камерой Photron FASTCAM SA5. Экспериментальная ячейка устанавливалась на стол оптического микроскопа. Для генерации электрического поля в ячейке использовался генератор сигналов Agilent 33522A, усиленный усилителем TaborElectronics 9100. Ячейка представляла с собой ячейку Хеле-шоу с вытравленной на одной из подложек пилообразной микроэлектродной системой.

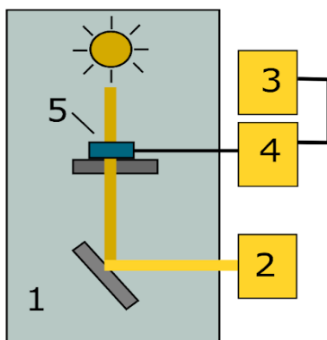


рис.1. Схема экспериментальной установки: 1-микроскоп; 2-камера; 3-генератор сигналов; 4-усилитель; 5-экспериментальная ячейка

Эмульсию (1 мл) прокачивали через ячейку, где на нее воздействовали неоднородным переменным электрическим полем с частотой 500 кГц и напряжением 300 В течение всех испытаний. На выходе эмульсия собиралась в тарированный дренажный контейнер. После пропускания эмульсии через ячейку были получены отдельные фазы воды и масла.

На основе полученных данных были построены зависимости объема отделившейся водной фазы от объемного расхода жидкости и от скорости потока. Разница в количестве оставшейся воды имело место вследствие того, что с увеличением объемного расхода увеличивалась и скорость потока, что приводило к высокому сдвиговому потоку. В таком случае капли сильно деформировались, и коалесценция могла не произойти. Наблюдалось образование вторичных капель из-за сильной деформации крупных капель, которая заключалась в растяжении вдоль потока и распаде на несколько мелких капель. Полученные результаты могут быть полезны для совершенствования существующих технологий разделения эмульсий или создания новых комбинированных методов

Исследование поддержано РФФ №19-11-00298.

Список публикаций:

[1] L. Kovaleva, R. Zinnatullin, A. Musin, A. Gabdratifikov, R. Sultanguzhin, V. Kireev//Influence of radio-frequency and microwave electromagnetic treatment on water-in-oil emulsion separation. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 614 2021. 126081

Разработка микрофлюидной платформы для изучения мобилизации остаточной нефти

Гарифуллин Искандар Шамилевич
Уфимский университет науки и технологий
Батыришин Эдуард Сафаргалиевич
is@bgutmo.ru

При разработке месторождений более 50% нефти остается не мобилизованной [1]. Дальнейшее извлечение нефти возможно с применением поверхностно активных веществ (ПАВ). Изучение эффективности новых методов увеличения нефтеотдачи может проводиться с использованием микрофлюидных чипов (МФЧ) [2]. Изготовление микрожидкостных устройств из стекла проводится в несколько этапов: подготовка заготовок, формирование микроканалов в подложке, изготовление ответных подложек, склейка. Каждый этап должен завершаться контролем качества проведенных процедур.

Разрабатывается микрофлюидная платформа для изучения мобилизации остаточной нефти при помощи ПАВ заводнения. Центральный элемент платформы - микрофлюидный чип. В работе описаны методы изготовления и влияние различных параметров производства чипа на его характеристики. Микрофлюидные устройства изготавливались из стекла СП-2-ЛЮКС методом фотолитографии с использованием фоторезиста ФП-3515, геометрия чипа представляет собой прямой канал прямоугольного сечения с боковыми тупиковыми порами.

Для получения микроструктуры чипа использовался метод мокрого травления, в частности, буферизированный раствор 40% фторида аммония NH_4F и 49% фтороводородная HF , склейка стеклянных поверхностей производилась по методу активации поверхности стекла [3]. Изучено влияние температуры дубления чипа на геометрию микроканалов, глубину и профиль каналов. Также рассмотрено влияние концентрации нейтрального детергента на прочность склеивания.

Профиль полученных каналов изучался с помощью оптического и электронного микроскопа. Для определения прочности склеивания была собрана экспериментальная установка (рис.1).

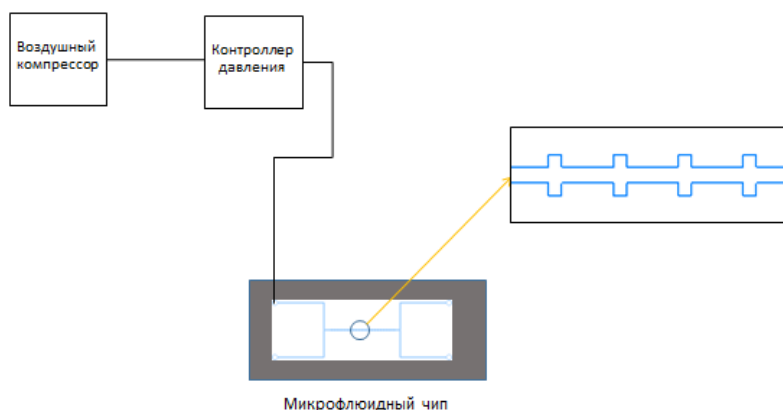


рис.1. Схема экспериментальной установки

Определены оптимальные режимы для изготовления микрофлюидных чипов: время травления, температура дубления, время активации поверхности. В дальнейшем МФЧ будет использован для изучения мобилизации остаточной нефти при помощи ПАВ заводнения.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ № 21-79-10212.

Список публикаций:

[1] Сургучев М.Л. // Вторичные и третичные методы увеличения нефтеотдачи пластов 1985. 309 с.

[2] Батыришин Э.С., Солнышкина О.А., Питюк Ю.А. // Изучение особенностей проточки сред с двумя масштабами пористости. Журнал Технической физики, 2021, 4, 553-557.

[3] F. Shunichi, O. Nobutoshi, T. Yo // A simple and reversible glass-glass bonding method to construct a microfluidic device and its application for cell recovery. The Royal Society of Chemistry. 2021. 11 с.

Влияние осаждения механической примеси на поток флюидов в стволе скважины

Карачурин Артур Ибрагимович

Уфимский университет науки и технологий

Закиров Марат Финатович, к.т.н.

karachurin95@bk.ru

При работе добывающей скважины в стволе скважины могут наблюдаться многофазные потоки флюидов с механическими примесями. Природа возникновения примесей различна: как от естественного происхождения в результате разрушения призабойной зоны пласта, так и искусственные, например, вынос проппанта при выполнении гидроразрыва пласта [3]. Таким образом, механические примеси представляют из себя сложную структуру, состоящую из парафино-смолистых отложений, мелких частиц горной породы и т.д. Осаждение механических примесей на стенках скважины осложняют работу подземного оборудования и при определённых условиях возникает осаждение механических примесей на стенке скважины. Возникает необходимость прогноза и анализа влияния осаждения механических примесей при проведении промыслово-геофизических исследований при различных профилях ствола скважины. В данной работе приводится попытка учёта осаждения механических примесей при термометрических исследованиях скважины.

Рассмотрим пример осаждения механических примесей в вертикальных и горизонтальных скважинах. По данному рисунку видно, что осаждение механической примеси приводит к уменьшению диаметра, но для вертикального и горизонтального она осаждается по-разному (рис. 1). Возникновение осадка накопления приводит тому, что флюид проходящий через трубу взаимодействует с горной породой не металл - горная порода, а металл - осаждённая механическая примесь - горная порода. Соответственно прямому теплообмену между горной породой и флюидом будет добавляться механическая примесь со своими теплопроводными свойствами.

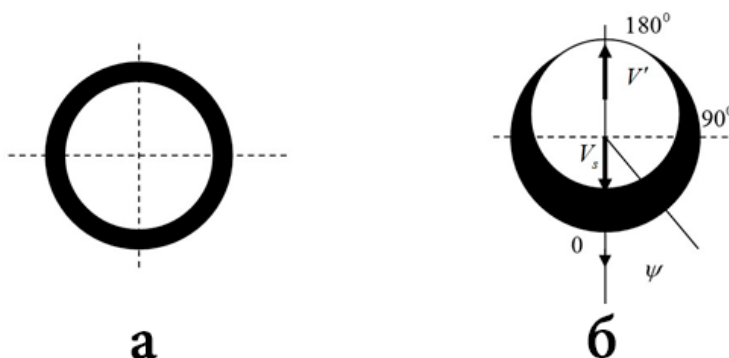


рис.1. Картина осаждения частиц в вертикальных (а) и горизонтальных трубах (б) [3].

К качественным признакам осаждения механических примесей по термометрическим исследованиям относятся изменения градиентов и соответственно наличие термоаномалий. Это связано с изменением условий теплообмена, например, из-за: 1) увеличение теплопроводности стенки, вследствие осаждения механических примесей, 2) уменьшение проходного сечения и соответственно увеличение скорости флюида. Действие таких эффектов приводит к изменению конвективного теплообмена. Влияние осаждения также приводит к изменению показаний методов расходомерии (РГД и СТИ). На участках осаждения будет наблюдаться увеличение скорости потока вследствие сужения ствола скважины.

Список публикаций:

[1] Валиуллин Р.А. Термогидродинамические исследования пластов и скважин нефтяных месторождений: учебное пособие. 2015. С. 213.

[2] Закиров М.Ф., Шарафутдинов Р.Ф., Валиуллин Р.А., Низаева И.Г. Моделирование скорости осаждения механических примесей в стволе горизонтальной скважины. // EAGE: 4-я научно-практическая конференция «Горизонтальные скважины 2021 проблемы перспективы». 2021. С. 4.

[3] Келбалиев Г.И., Гусейнова Л.В., Расулов С.Р., Сулейманов Г.З. Моделирование процессов осаждения частиц различной природы на поверхности трубопроводов // Журнал "Нефтепромысловое дело". 2014. №5. С. 25 – 29.

Отражение и преломление косо́й волны на границе раздела «вода – песок, насыщенный водой или газогидратом»

Каримова Гульназ Римовна

Институт механики им. Р.Р. Мавлютова УФИЦ РАН

Галиакбарова Эмилия Вильевна, д.ф.-м.н.

gulnazkar69@gmail.com

Интересным способом исследования дна морских водоемов является метод, основанный на особенностях отражения и прохождения акустических волн при нормальном и косом падении на границу раздела двух сред [1, 2, 3, 4,5].

В настоящей работе построена математическая модель отражения и прохождения звуковой волны на границе раздела «вода – песок, насыщенный водой или газогидратом метана». Предполагается, что волна падает и отражается от плоскости раздела $z=0$, механическое состояние не зависит от координаты оси y , то есть отсутствует горизонтальное поперечное смещение и источник звука расположен вдали от границы раздела (рис.1). Фронт падающей волны к поверхности раздела расположен под углом $\theta \leq 90^\circ$. Считаем, что верхняя полуплоскость – вода (f), сжимаемая в акустическом приближении, а нижняя полуплоскость песок (s) – упругое изотропное тело. Для каждой из областей записаны основные уравнения потенциалов для падающей, отраженной, прошедшей продольной и поперечной волн, вектора смещения частиц среды, компоненты тензоров напряжений. Эти уравнения дополнены граничными условиями при $z=0$, где составляющие смещений в воде и пористой среде равны, скорости равны, касательные напряжения равны нулю.

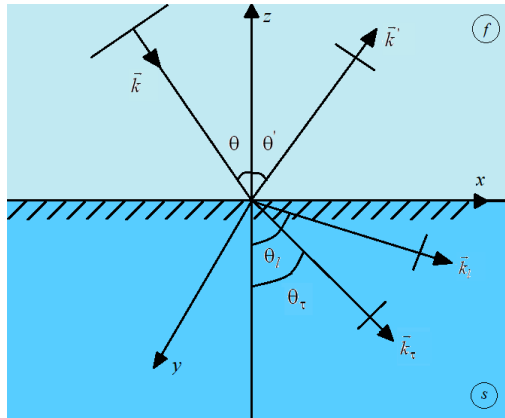


рис.1. Схема распространения падающей, отражённой и проходящих волн на границе раздела воды и пористой среды

На основе экспериментальных данных [6] значений скоростей продольных и поперечных волн получены зависимости углов преломления продольной и поперечной волн от угла падения (рис.2), а также зависимости модулей коэффициентов отражения, прохождения продольной и поперечной волн от угла падения при насыщенности $S=0.2$, где S – доля объема пор, занимаемая флюидом (водой или газогидратом) в пористой среде. В песке, насыщенного водой при любых насыщенностях будет существовать прошедшая продольная и поперечная волны. Для песка, насыщенного гидратом образуются углы, где происходит полное внутреннее отражение и поэтому можно рекомендовать проводить обследование грунта на наличие газогидрата при углах падения, находящихся между углами с полным внутренним отражением.

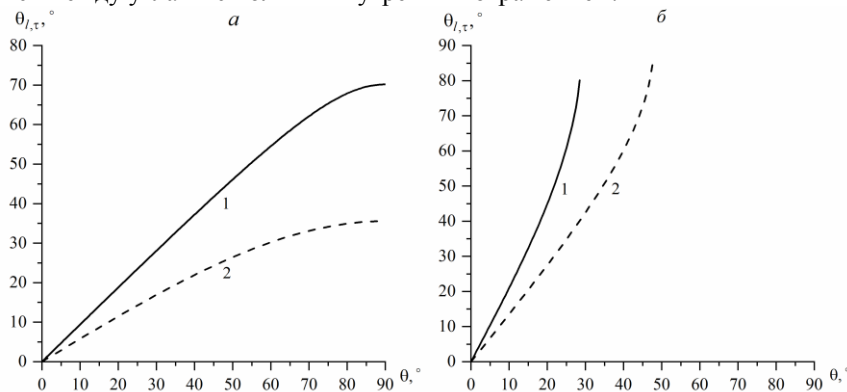


рис.2. Зависимость углов преломления продольной θ_l (1) и поперечной θ_t (2) волн от угла падения θ для песка, насыщенного водой (а) и газогидратом (б)

Исследования выполнены при финансовой поддержке средствами госбюджета по госзаданию 0246–2019–0052.

Список публикаций:

- [1] Лепендин Л. Ф. Акустика // Учеб. пособие для вузов. М.: Высш. школа, 1978.
- [2] Исакович М. А. Общая акустика // Исакович М.А. М.: Наука, 1973.
- [3] Ландау Л. Д. Теоретическая физика. Т. VI. Гидродинамика / Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. М.: Наука, 1986.
- [4] Бреховских Л. М. Волны в слоистых средах. Москва: Наука, 1973.
- [5] Шагапов В. Ш., Сарапулова В. В. Особенности отражения и преломления акустических волн на границе раздела между газом и дисперсной системой // Прикладная механика и техническая физика. 2015. Т. 56. № 5(333). С. 119-129.
- [6] Дучков А. Д., Дучков А. А., Дугаров Г. А., Дробчик А. Н. Скорости ультразвуковых волн в песчаных образцах, содержащих воду, лёд или гидраты метана и тетрагидрофурана // Доклады академии наук. 2018. Т. 478, №1. С. 94-99.

Диагностика коллекторских характеристик призабойной зоны скважины по динамике собственных колебаний столба жидкости в НКТ

Мамаева Зилия Заитовна

Институт механики им. Р.Р. Мавлютова УФИЦ РАН

Башмаков Рустэм Абдрауфович, к.ф.-м.н.

zilia16@mail.ru

Нефтяная промышленность – это крупнейшая отрасль, развитие которой является неотъемлемой частью всей мировой промышленности. На сегодняшний день добыча углеводородов считается сложным процессом, нуждающийся в исследованиях и доработках. Основными причинами усложнения считается повышение доли трудноизвлекаемых запасов нефти, снижение продуктивности скважин и износ технической составляющей. Для устранения данных проблем необходимо проводить контроль за состоянием скважин и диагностику параметров призабойной зоны пласта, вследствие чего разрабатываются и применяются различные геофизические методы исследования скважин (ГИС) (электрические, радиоактивные, акустические, магнитные, термические и др.) [1, 2]. Акустическая спектроскопия скважин – один из методов ГИС, который предполагает возбуждение собственных колебаний столба жидкости в скважине [3], и в дальнейшем по полученным волновым характеристикам позволяет определить протяженность столба жидкости, диаметр скважины, коллекторские характеристики пласта, примыкающей к скважине.

В представленной работе решена задача о динамике собственных колебаниях столба жидкости в вертикальной скважине, возбужденных посредством гидроудара. Построена математическая модель данного процесса, в которой были использованы уравнения сохранения масс и импульсов в области скважины, уравнения сохранения масс в области открытого участка скважины, уравнение для описания упругого режима фильтрации в сообщающемся со скважиной пласте [4].

Используя решение уравнения в виде стоячих волн с учетом граничных и начальных условий получено характеристическое уравнение [4] для определения частоты, декремента и коэффициента затухания колебаний. Исходя из данного уравнения проведен анализ влияние основных параметров скважины на изменение частоты колебания, декремента и коэффициента затухания, и исследовано динамика давления в различных точках скважины.

Представлены зависимости собственной частоты Ω (а), коэффициента затухания δ (б), а также декремента затухания Δ (в) от проницаемости пласта при различных значениях протяженности зоны перфорации скважины (рис.1). Видно, что с увеличением протяженности зоны перфорации уменьшается частота колебаний в диапазоне проницаемости $k_p=10^{-14}\div 10^{-11}$ м². Заметим, что зависимость коэффициента и декремента затухания от проницаемости имеет немонотонный характер, и в отмеченном выше диапазоне проницаемости пласта оба параметра увеличиваются с ростом значения протяженности зоны перфорации.

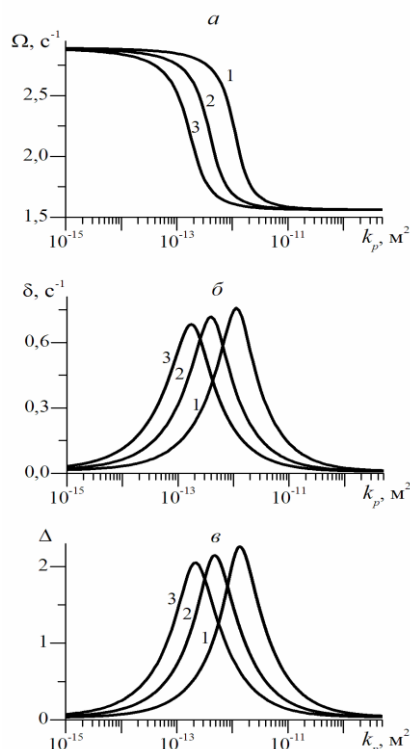


рис.1. Зависимость собственной частоты (а), коэффициента затухания (б), декремента затухания (в) от коэффициента проницаемости пласта при различных значениях протяженности зоны перфорации скважины: 1 – $l_h = 2$ м, 2 – $l_h = 5$ м, 3 – $l_h = 10$ м.

Исследования выполнены при финансовой поддержке средствами госбюджета по госзаданию 0246–2019–0052.

Список публикаций:

- [1] Косков В. Н. Геофизические исследования скважин: Учеб. Пособие / Перм. гос. техн. ун-т. Пермь. 2004.
 [2] Горбачев Ю. И. Геофизические исследования скважин. Москва: Недра, 1990.
 [3] Горное дело: Терминологический словарь / ред. К. Н. Трубецкой, Д. Р. Каплунова. – 5-е изд., перераб. и доп. – Москва: Горная книга, 2016 – 635с.
 [4] Шагапов В. Ш., Башмаков Р. А., Рафикова Г. Р., Мамаева З. З. Затухающие собственные колебания жидкости в скважине, сообщаемой с пластом // Прикладная механика и техническая физика. 2020. № 4. С. 5-14.

Электромагнитное воздействие как один из методов улучшения реологических свойств нефтей

Мухарямова Гульшат Ильдаровна

Зиннатуллин Расуль Рашитович, Киреев Виктор Николаевич

Уфимский университет науки и технологий

Ковалева Лиана Ароновна, д.т.н.

gulshat-karimova-1993@mail.ru

В связи с истощением легкоизвлекаемых запасов нефти, наблюдается повышение интереса к добыче, транспорту и переработке так называемых трудноизвлекаемых высоковязких нефтей. В связи с этим актуальной становится задача управления качеством таких нефтей. Одним из перспективных методов улучшения реологических свойств высоковязкой нефти является электромагнитная (ЭМ) обработка.

В рамках данной работы выполнены экспериментально-аналитические исследования по анализу высокочастотного (ВЧ) и сверхвысокочастотного (СВЧ) электромагнитных воздействий на реологические свойства ряда высоковязких нефтей. В результате проведенных исследований выявлено, что электромагнитная обработка снижает вязкость исследованных высоковязких нефтей в интервале температур от 0°C до 20°C. Установлено, что эффективность влияния электромагнитной обработки на реологические свойства существенно зависит от компонентного состава нефти. Чем более вязкая нефть, чем больше в ней асфальтенов, парафинов, смол, тем выше эффективность ЭМ методов воздействия, причем СВЧ ЭМ метод воздействия

наиболее эффективен для нефтей с большим содержанием асфальтенов и смол, ВЧ метод – для нефтей с высоким содержанием парафинов.

С целью аппроксимации полученных экспериментальных данных зависимостей вязкости нефти μ от температуры T было применено уравнение Филонова-Рейнольдса [1] в виде кусочно-непрерывной функции:

$$\mu(T) = \begin{cases} \mu_1 e^{-u_1 T}, & T \leq T_* \\ \mu_2 e^{-u_2 T}, & T > T_* \end{cases} \quad (1)$$

где μ_1, μ_2, u_1, u_2 – экспериментально установленные постоянные коэффициенты для каждого из образцов нефти,

$$T_* = \frac{\ln(\mu_1 / \mu_2)}{u_1 - u_2} \quad (2)$$

Все полученные в экспериментах данные хорошо описываются выбранной экспоненциальной зависимостью. Степень достоверности аппроксимации составляет более 98 процентов.

В результате проведенных в работе экспериментально-аналитических исследований высокочастотного (ВЧ) и сверхвысокочастотного (СВЧ) электромагнитных воздействий на реологические свойства ряда высоковязких нефтей выявлены причины, отвечающие за характер изменения реологических свойств указанных нефтей после ЭМ воздействий. Показано, что результаты ЭМ воздействий зависят от состава нефтей, в частности от содержания асфальтенов, парафинов и смол. Получены аппроксимационные зависимости вязкости исследованных нефтей от температуры без обработки, после ВЧ и после СВЧ обработок, эти уравнения могут найти широкое применение в практике эксплуатации и проектирования нефтепроводов для данных нефтей при проведении гидравлических расчетов, подборе насосно-силового оборудования, определении режимов работ.

Список публикаций:

[1] Тугунов П.И., Новоселов В.Ф. Типовые расчеты при проектировании и эксплуатации нефтебаз и нефтепроводов. – М.: Недра, 1981. – 177 с.

Численное исследование течения вязких жидкостей в каналах кольцевого типа

Мухутдинова Айгуль Айратовна

Уфимский федеральный исследовательский центр РАН

Урманчеев С.Ф.

muhutdinova18@gmail.com

В данной работе рассматривается течение термовязкой несжимаемой жидкости в канале кольцевого типа, образованном двумя соосными цилиндрами, на поверхностях которого заданы условия конвективного теплообмена. Течение жидкости происходит под действием постоянного перепада давления Δp .

Введем цилиндрическую систему координат, ось z которой направлена вдоль оси цилиндров. Кольцевой канал имеет длину L , радиус внутреннего цилиндра – r_0 , а радиус полости внешнего цилиндра – R , причём $R > r_0$ (рис.1). Будем считать канал сильно удлиненным ($L \gg [R - r_0]$).

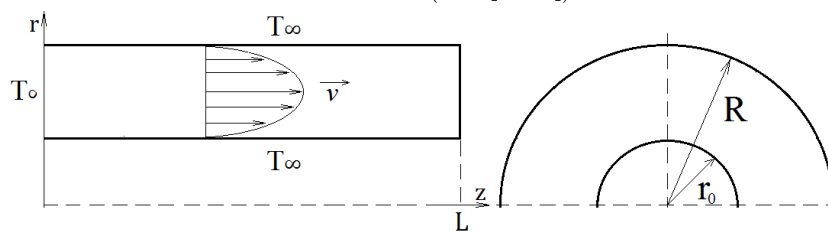


рис. 1. Схема канала

Математическая модель состоит из уравнений неразрывности, Навье-Стокса и сохранения энергии, записанных в цилиндрической системе координат с учетом осевой симметрии [1] в безразмерном виде.

Рассматриваются два вида зависимостей вязкости жидкости от температуры: монотонная и аномальная. При монотонной зависимости вязкость убывает с ростом температуры, что характерно для большинства капельных жидкостей [2-3]. В случае аномальной зависимости, вязкость немонотонно меняется в определенном температурном диапазоне [4]. Такими свойствами обладает ряд полимерных жидкостей, применяемых в химических технологиях, например, в качестве потокоотклоняющих реагентов.

Система уравнений математической модели решалась численно с использованием метода контрольного объема и алгоритма SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equation) [5], модифицированного для учета переменного коэффициента вязкости. Оригинальный компьютерный код реализован на языке программирования C++ в кроссплатформенной среде разработки Qt Creator.

В результате численного моделирования были получены графики скоростей и распределения температуры и вязкости в различных сечениях кольцевого канала. Было установлено, что области повышенной вязкости формируются в зависимости от интенсивности теплообмена, который определяет поток жидкости в канале и скорость его течения.

Исследования выполнены при финансовой поддержке средствами госбюджета по госзаданию 0246–2019–0052.

Список публикаций:

- [1] Кочин Н. Е., Кибель И.А., Розе Н.В. // Теоретическая гидромеханика. Часть 2 М.: Физматлит. 1963. С. 728.
- [2] Френкель Я.И. // Кинетическая теория жидкостей Издательство "Наука", Ленинградское отделение, с. 592,1975
- [3] Nizamova A. D., Kireev V. N., Urmancheev S. F. // On stability of thermoviscous liquids laminar flow, Bulletin of Tyumen State University: Ecology and Nature Management, vol 1, № 2, p 104, 2015.
- [4] Urmancheev S. F., Kireev V. N. // Steady flow of a liquid with a temperature anomaly of viscosity, Doklady Physics, vol 49, № 5, p 328-33, 2004.
- [5] Патанкар С. В. // Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости. М.: МЭИ, 1984. С. 145.

Исследование характеристик акустической волны в зависимости от параметров среды

Сафиуллин Аскар Русланович

Уфимский университет науки и технологий

Галимзянов Марат Назипович, к.ф.-м.н.

safiullinak@mail.ru

Из литературы известно, что физико-химические свойства жидкостей в метастабильном состоянии в основном определяются наличием в их составе различных включений, например газовых пузырьков или твердых частиц [1]. В данном случае рассмотрены особенности распространения звука и развития неустойчивости в перегретой жидкости, содержащей газовые зародыши, в зависимости от степени ее перегрева, определяемой как $\Delta T_0 = T_0 - T_s(p_0)$.

Пусть в жидкости, находящейся при температуре T_0 и при давлении p_0 , имеются сферические пузырьки радиусом a_0 , которые содержат пар и нерастворимый в жидкой фазе газ. Рассмотрим двумерные акустические волны. Вертикальную ось Ox направим перпендикулярно к плоскости раздела между однофазной и двухфазной средами в сторону жидкости, а начало координат положим на границе раздела. Горизонтальная ось Oy направлена вдоль границы раздела (рис. 1).

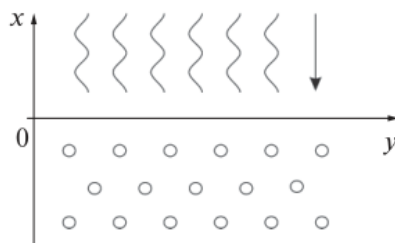


рис. 1. Схематическое изображение расчетной области

Для описания свойств акустических волн примем следующую систему уравнений, состоящую из приведенного закона сохранения массы, уравнений импульсов, уравнения Рэлея-Ламба, уравнения теплопроводности и диффузии [2, 3]:

$$\frac{1}{c_T^2} \frac{\partial p_1}{\partial t} + \rho_{10}^0 \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) - 3\rho_{10}^0 \frac{\alpha_0}{a_0} \frac{\partial a}{\partial t} = 0,$$

$$\rho_{i_0}^0 \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial p_l}{\partial x} = 0, \rho_{i_0}^0 \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial p_l}{\partial y} = 0,$$

$$\rho_{i_0}^0 \alpha_0 \frac{\partial^2 a}{\partial t^2} + 4 \frac{\rho_{i_0}^0 v_l^{\mu}}{\alpha_0} \frac{\partial a}{\partial t} = p_g - p_l + \frac{2\sigma}{a_0^2} a,$$

$$\rho_{i_0}^0 c_g \frac{\partial T_g^i}{\partial t} = \frac{\lambda_g}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda_g r^2 \frac{\partial T_g^i}{\partial r} \right) + \frac{\partial p_g}{\partial t}, \frac{\partial k^i}{\partial t} = \frac{D}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial k^i}{\partial r},$$

где индексы $i = l, v, a$ относятся к параметрам жидкости, пара и газа, а нижний индекс (0) соответствует начальному состоянию, u и v – скорости среды, a – радиус пузырьков, C_l – скорость звука в жидкости, α_0 – объемное содержание пузырьков, v_l^{μ} – кинематическая вязкость жидкости, σ – коэффициент поверхностного натяжения, D – коэффициент диффузии.

Для пузырьковой жидкости, описанной выше, определено [2] условие для границы устойчивых и неустойчивых состояний:

$$\alpha_0 = \left(\frac{2}{3} \frac{\sigma}{\rho_{g0} \alpha_0} - (1 - k_0) H_a \right) \frac{\beta}{k_0 \gamma} \quad (1)$$

В случае отсутствия газа в пузырьках получим:

$$\alpha_0 = \frac{2}{3} \frac{\sigma}{\rho_{i_0}^0 \alpha_0 c_L^2}, \quad C_L = \frac{\rho_{g0}^0 L}{\rho_{i_0}^0 \sqrt{c_L^2 \alpha_0}} \quad (2)$$

На основе данных уравнений, были проведены численные расчеты. Результаты представлены на рисунке 2. Обозначения 1, 2, 3 отвечают за значение давления $p_0 = 0.1, 1$ и 10 МПа, один, два и три штриха обозначают перегрев $\Delta T_0 = 10^{-2}, 10^{-1}$ и 1 К.

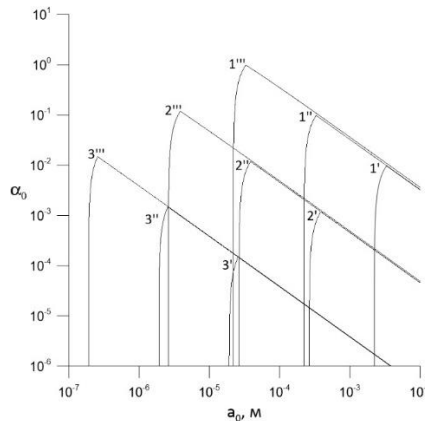


рис.2. Границы раздела устойчивых и неустойчивых состояний перегретой воды с паровоздушными пузырьками. Зависимость $\alpha_0 = \alpha_0(a_0)$

Кривые состоят из двух частей. Первая часть – восходящая – вычислена по формуле (1) и соответствует концентрации пара $k_0 < 1$. На нисходящем участке концентрация $k_0 = 1$ и объемное содержание вычисляется по формулам (2). Зоны внутри кривых соответствуют неустойчивым состояниям, снаружи – устойчивым. Чем меньше перегрев, тем правее находится кривая и, следовательно, больше зона устойчивости.

Список публикаций:

[1] Нигматулин Р.И. Динамика многофазных сред. - М.: Наука, 1987, Т. 1, 2.

[2] Шагапов, В. Ш. Особенности устойчивости и акустических свойств перегретой жидкости с газовыми зародышами при повышении давления / В. Ш. Шагапов, М. Н. Галимзянов, И. И. Вдовенко // Теплофизика высоких температур. – 2019. – Т. 57, № 5. – С. 748-754.

[3] Шагапов, В. Ш. Особенности отражения и прохождения акустических волн на границе "чистой" и пузырьковой жидкостей при прямом их падении / В. Ш. Шагапов, М. Н. Галимзянов, И. И. Вдовенко // Теплофизика высоких температур. – 2019. – Т. 57, № 2. – С. 284-290.

Численное моделирование заземления нефти в поросетевых микромоделях

Фазлетдинов Спартак Уралович¹

Питюк Юлия Айратовна^{1,2}, Саметов Сергей Павлович^{1,2}

¹Уфимский университет науки и технологий

²ООО «РН-БашиНИПИнефть»

Питюк Юлия Айратовна

spartak.fazlet@gmail.com

В настоящее время часто используются образцы керна с участков нефтяных пластов для понимания и исследования фильтрационных процессов. Однако, присутствуют ряд недостатков экспериментов по заводнению керна, таких как непрозрачность образца, специфичность отобранного участка, неоднозначность экспериментальных параметров. Данные особенности препятствуют проведению фундаментальных исследований в лабораторных условиях. Использование микромоделей вместо образцов керна позволяет наблюдать за течением двухфазной жидкости на масштабе пор и изучать процессы, протекающие на микроуровне.

Микромоделей с различной геометрией микроканалов использовались для изучения потоков жидкостей с 1980-х годов [1,2]. Геометрия каналов, размер, структура пор разрабатывается таким образом, чтобы можно было изучить конкретное явление. В целом, геометрию порового пространства микромоделей можно разделить на три основных типа: сеть с упорядоченным распределением пор [3], сеть со случайным распределением пор [4] и сеть, отображающая структуру пор реального керна [5]. В настоящей работе использовалась поросетевая модель, состоящая из пор и каналов со случайным распределением (рис.1 б), каналы в которой распложены под углом 45° к горизонтальной оси.

Численная модель (рис.1 а) была построена на основе экспериментальной модели, рассматривалась область в верхнем левом углу микрофлюидного чипа, включающая 3-4 поры по вертикальной оси, и 6-7 пор – по горизонтальной оси (рис.2 б). В начальный момент времени вся модель была заполнена нефтью (плотность $\rho_o = 800 \text{ кг/м}^3$, динамическая вязкость $\mu_o = 60 \text{ мПа} \cdot \text{с}$), кроме входной части, которая заполнялась вытесняющим агентом – водой (плотность $\rho_w = 1000 \text{ кг/м}^3$, динамическая вязкость $\mu_w = 1 \text{ мПа} \cdot \text{с}$). Слева закачивалась вода с постоянной скоростью $v = 0.1 \text{ мм/с}$, на правой границе поддерживалось постоянное давление. Коэффициент поверхностного натяжения равен $\sigma = 0.0271 \text{ Н/м}$.

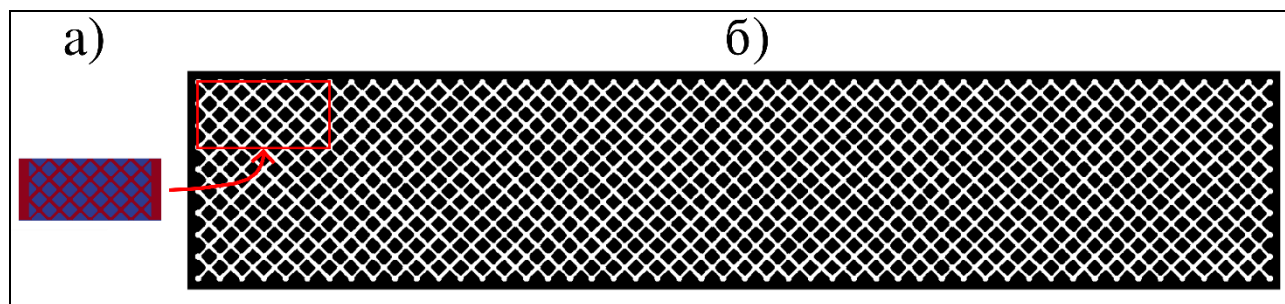


рис 1. Геометрия численной модели (а) и геометрия экспериментальной модели (б)

Для численного моделирования использовался решатель hybridPorousInterFoam [6] открытой интегрируемой платформы OpenFOAM. Для описания многофазного течения внутри каналов использовались уравнения Навье-Стокса.

Проведены расчеты вытеснения нефти водой из поросетевой модели для гидрофобной и гидрофильной поверхностей. На рис. 2 представлены характерны картины вытеснения нефти водой в различные моменты времени. Из рисунка видно, что вода движется преимущественно по верхним порам и в гидрофобном (рис. 2 б), и в гидрофильном (рис. 2 а) случаях, но в первом случае происходит захват нефти в части каналов и пор. Данный эффект можно объяснить тем, что в гидрофобном случае капиллярные силы направлены против течения, а в гидрофильном – по течению. Избежать такого захвата можно путем уменьшения капиллярных сил. Добиться этого можно, например, за счет уменьшения коэффициента поверхностного натяжения с применением различных агентов вытеснения [7], или за счет изменения контактного угла смачивания с применением наночастиц [8].

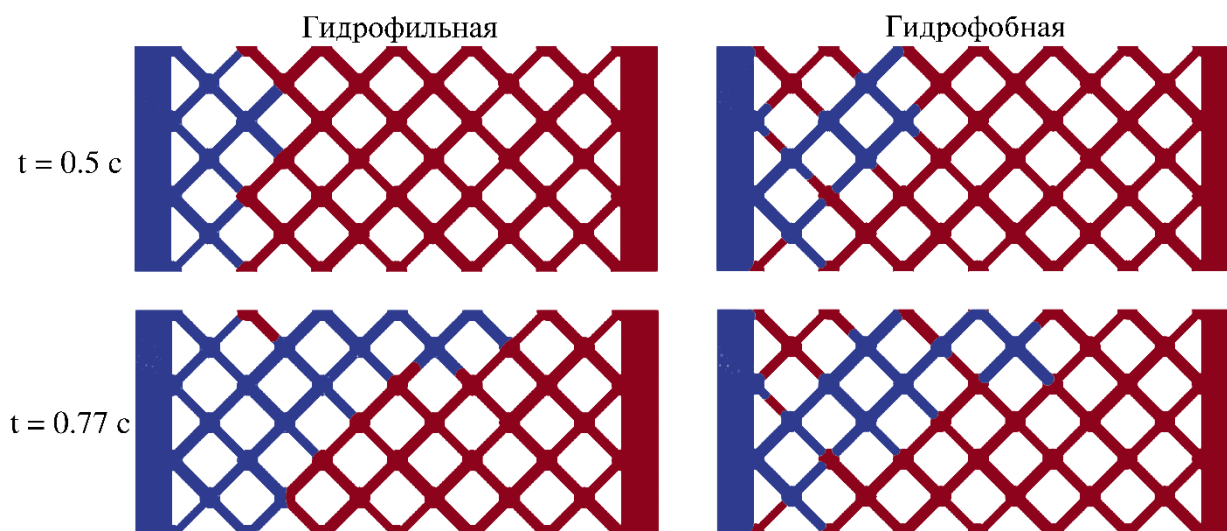


рис.2. Результаты расчетов вытеснения нефти в поросетевой модели для гидрофильной и гидрофобной поверхностей в моменты времени $t=0.5$ с и $t=0.77$ с.

Таким образом, целью данной работы являлось численное моделирование вытеснения нефти водой в поросетевой микромодели. В дальнейшем планируется изучить процессы вытеснения в представленной поросетевой модели с использованием различных агентов вытеснения для снижения остаточной нефтенасыщенности.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 21-79-10212).

Список публикаций:

- [1] Koplik J. et al. *Immiscible fluid displacement in small networks* // *Journal of Colloid and interface Science*. – 1985. – Т. 108. – №. 2. – С. 304-330
- [2] Lenormand R., Touboul E., Zarcone C. *Numerical models and experiments on immiscible displacements in porous media* // *Journal of fluid mechanics*. – 1988. – Т. 189. – С. 165-187
- [3] Hsu S. Y., Zhang Z. Y., Tsao C. W. *Thermoplastic micromodel investigation of two-phase flows in a fractured porous medium* // *Micromachines*. – 2017. – Т. 8. – №. 2. – С. 38
- [4] Rangel-German E. R., Kovscek A. R. *A micromodel investigation of two-phase matrix-fracture transfer mechanisms* // *Water resources research*. – 2006. – Т. 42. – №. 3
- [5] Kovscek A. R., Tang G. Q., Radke C. J. *Verification of Roof snap off as a foam-generation mechanism in porous media at steady state* // *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*. – 2007. – Т. 302. – №. 1-3. – С. 251-260
- [6] Carrillo F. J., Bourg I. C., Soulaine C., *Multiphase flow modeling in multiscale porous media: an open-source micro-continuum approach* // *Journal of Computational Physics: X*. 2020. Т. 8. – С. 100073. DOI:10.48550
- [7] Yiya Wang, Xinlu Han, Jinyu Li et al. // *Review on Oil Displacement Technologies of Enhanced Oil Recovery: State-of-the-Art and Outlook*. *Energy Fuels* 2023, 37, 4, 2539–2568. <https://doi.org/10.1021/acs.energyfuels.2c03625>
- [8] Rostami, P., Sharifi, M., Aminshahidy, B. et al. // *The effect of nanoparticles on wettability alteration for enhanced oil recovery: micromodel experimental studies and CFD simulation*. *Pet. Sci.* 16, 859–873 (2019). <https://doi.org/10.1007/s12182-019-0312-z>

Экспериментальное исследование фильтрации различных нефтей в модели пористой среды

Фарвазов Ленар Эрикович

Уфимский университет науки и технологий

Зиннатуллин Расул Рашитович, к.т.н.

farvazovlenar@gmail.com

В современном мире нефть является одним из ключевых источников энергии, и ее добыча и переработка являются важными задачами для нефтяной промышленности. Однако, традиционные методы добычи нефти часто связаны с негативным воздействием на окружающую среду и уменьшением запасов природных ресурсов. В связи с этим, поиск новых технологий добычи нефти становится все более актуальным.

Одним из перспективных направлений в области добычи нефти являются экспериментальные исследования использования электромагнитного поля для добычи нефти из пласта. Этот метод основан на

принципе, что нефтенасыщенная порода является полярной диэлектрической средой, что позволяет использовать электромагнитное поле для диэлектрического разогрева нефти [1].

В настоящей работе была исследована фильтрация двух видов нефти с различными физико-химическими свойствами через модель пористой среды. Модель пористой среды представляет собой ячейку с фильтрационной областью, заполненной стеклянными шариками (рис.1): 1 – фитинги, 2 – скрепляющие болты, 3 – прокладки, 4 – электроды, 5 – фильтрационная область.

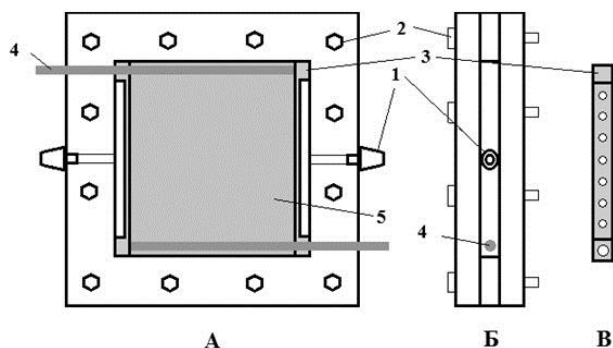


рис.1 Схематическое изображение ячейки: вид сверху (А), вид сбоку (Б); прокладка (В)

Экспериментальная установка состояла из воздушного безмасляного компрессора, посредством которого нагнеталось давление, контроллера давления, сосуда с фильтруемой жидкостью, ячейки с электродами, сосуда, установленного на прецизионных электронных весах. Элементы установки были последовательно соединены прозрачными трубками. Воздействие ВЧ электромагнитного поля осуществлялось генератором/усилителем электромагнитных полей, подсоединенного клеммами к электродам ячейки. Сосуд на весах и трубка между этим сосудом и ячейкой была заполнена водой. Измерение проводилось на весах с использованием программы RsWeight.

В ходе экспериментов с двумя видами нефти были получены следующие результаты: расход нефти с вязкостью $\mu=6.54$ сПз не изменяется при воздействии ВЧ поля; расход нефти с вязкостью $\mu=10.63$ сПз уменьшается при воздействии ВЧ поля (рис.2).

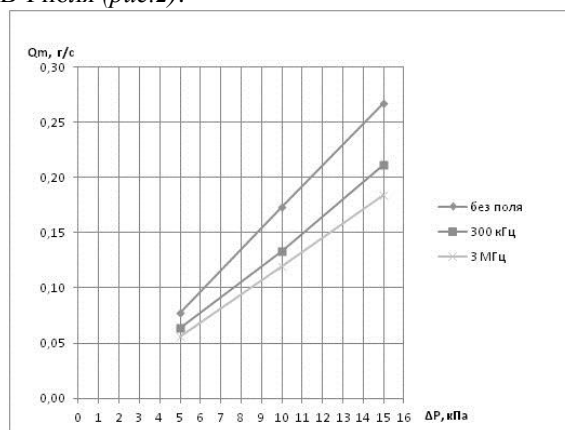


рис.2 Зависимость расхода нефти с вязкостью $\mu=10.63$ сПз

На основе этих данных можно предложить, что течению вязкой жидкости мешают подемоторные силы ввиду того, что, из-за расположения электродов, напряженность поля направлена перпендикулярно направлению фильтрации жидкости.

Исследование выполнено при поддержке гранта Российского научного фонда (проект №22-11-20042).

Список публикаций:

[1] Зиннатуллин Р. Р., Ковалева Л. А. Исследования диэлектрических свойств нефтяных дисперсных систем в зависимости от соотношения асфальтосмолистых веществ // Письма в ЖТФ. – 2022. – Т. 48. – №. 4. – С. 41.

Численное изучение особенностей течения жидкости в микромодели пористой среды

Фаткуллина Назгуль Байтулловна

Булатова Айгузель Загировна

Уфимский университет науки и технологий

Солнышкина Ольга Александровна, к.ф.-м.н.

nazgulbay@mail.ru

Изучение течения жидкостей в пористых средах является актуальной задачей для нефтяной промышленности, тесно связанной с добычей углеводородов из карбонатных коллекторов. Зональную неоднородность таких пластов учитывает модель двойной пористости, в которой предполагается, что пласт состоит из матрицы, являющейся пористой средой, и твердых включений с аномально низкой проницаемостью. Кроме того, данная задача имеет прикладное значение при производстве микротеплообменников, используемых в радиочастотной электронике и биомедицинских устройствах. Эффективность микротеплообменников зависит от характеристик жидкости, материала, из которого изготавливается чип и от его геометрических параметров, которые необходимо учитывать при моделировании течения жидкости в пористых средах. Известны два основных подхода к описанию пористой среды – капиллярная модель, представленная в виде сети микроканалов, и структурная, состоящая из множества микроразмерных столбиков.

Рассматривается течение вязкой несжимаемой жидкости вокруг неподвижных недеформируемых элементов внутри плоского микроканала, которые в совокупности представляют собой структурную модель двойной пористости. На входе в канал задается объемный расход Q . Все процессы протекают при малых числах Рейнольдса ($Re < 1$) и изотермических условиях. Такие течения описываются стационарными уравнениями Стокса

$$-\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} = 0, \quad \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (1)$$

где p – давление, которое включает в себя гидростатический компонент, μ – динамическая вязкость жидкости, \mathbf{u} – вектор скорости.

Задача решается при следующих граничных условиях: на поверхности недеформируемых столбиков и на стенках микроканала задается условие прилипания, а на входе и выходе микроканала задается условие периодичности.

Геометрия расчетной области представлена недеформируемыми цилиндрическими элементами, расположенными поперек потока внутри прямоугольного микроканала. Для формирования второго масштаба пористости при равном количестве столбиков изменялось их пространственное распределение – выделялись группы по 9 элементов, расположенных под углом 45 градусов (пористость 0.67) или 90 градусов (пористость 0.8) к направлению потока жидкости. Для оценки гидравлического радиуса образованных поровых каналов используется отношение ширины широких поровых каналов (w_b) к узким (w_s): $k = w_b/w_s$. Для рассматриваемых в данной работе вариантов структур коэффициент k варьируется от 1 до 2.5. На рисунке 1 показан переход от структур с одним характерным пространственным масштабом к структурам с двумя масштабами, угол наклона массива столбиков – 90 градусов.

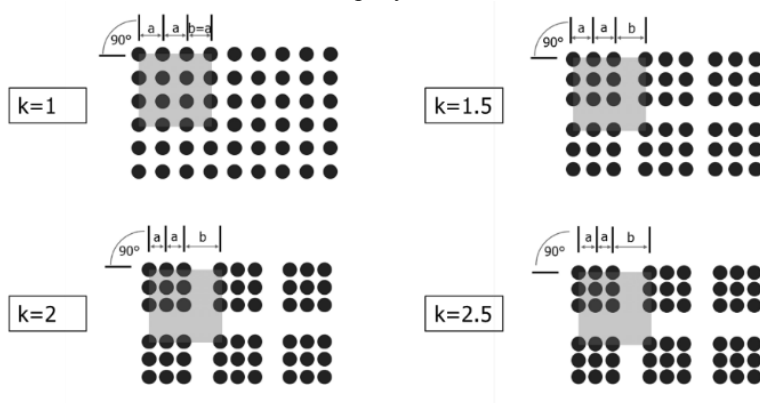


рис. 1. Схематическое изображение пространственного распределения недеформируемых цилиндрических элементов в микромодели двойной пористости.

Для решения задачи использовался численный подход, основанный на трехмерном методе граничных элементов, ускоренном быстрым методом мультиполей на гетерогенных вычислительных архитектурах [1]. Впервые такой подход к моделированию процессов в каналах со сложной геометрией был применен в [2].

В рамках данной работы проведено исследование влияния параметров микромоделли двойной пористости на структуру потока жидкости на основе эффективного численного подхода. Показано, что при увеличении соотношения гидравлического радиуса широких поровых каналов к узким распределение скоростей меняется. Основной поток жидкости происходит в широких каналах вдоль потока, а в области модели с узкими каналами скорость течения жидкости существенно уменьшается. Максимальная скорость течения жидкости наблюдается в поровых каналах вдоль оси Ox параллельно потоку. Сравнение результатов моделирования течения жидкости в микромоделли двойной пористости с углом наклона массивов столбиков в 45 градусов с экспериментальными данными проведено в [3].

Полученные результаты могут быть использованы для верификации моделей, описывающих течения в средах с двойной пористостью. Подобные модели используются для описания фильтрации в горных породах, технологических процессов изготовления волокнистых композитов и микротеплообменников. Кроме того, изучение течений в подобных структурах является важной задачей, связанной с повышением эффективности теплообменников для микроэлектронных устройств.

Список публикаций:

- [1] Абрамова О.А., Иткулова Ю.А., Гумеров Н.А., Ахатов И.Ш. // *Вычислительные методы и программирование*. 2013. Т. 14. № 4. С. 438-450.
 [2] Itkulova Y.A., Solnyshkina O.A., Gumerov N.A. // *ASME international mechanical engineering congress and exposition, proceedings (IMECE)*. 2012. Vol. 7. 873-881 pp.
 [3] Солнышкина О.А., Батыришин Э.С., Питюк Ю.А. // *Известия российской академии наук. Механика жидкости и газа*. 2021. № 4. С. 9-18.

Исследование динамики волн давления в канале с пузырьковым кластером

Фаттахов Салават Радикович

Уфимский университет науки и технологий

Галимзянов Марат Назипович, к.ф.-м.н.

salavat232001232001@mail.ru

Особенности распространения волн в пузырьковой жидкости связаны с совокупным взаимодействием нелинейных, дисперсионных и диссипативных эффектов. В жидкости с пузырьками свойства практически несжимаемой жидкости, являющейся несущей фазой, кардинально меняются при небольшом по объему (а тем более по массе) добавлении газа (пузырьков), являющегося дисперсной фазой. Особенность пузырьковых жидкостей обусловлена их высокой статической сжимаемостью при сохранении высокой плотности, близкой к плотности жидкости, что в свою очередь приводит к малой равновесной скорости звука. Интересной особенностью пузырьковой жидкости в динамических процессах является проявление инерции жидкости при изменении объема смеси за счет сжатия или расширения пузырьков [1]. К настоящему времени одномерные волны в пузырьковой жидкости хорошо изучены [1–3] и на данный момент активно исследуются двумерные волны. Одной из интереснейших задач волновой динамики пузырьковой жидкости, в которой ярко проявляются многомерные эффекты является взаимодействие ударной волны с пузырьковым кластером в жидкости.

Пусть в канале, заполненном жидкостью, находится прилегающая к одному из торцевых границ канала пузырьковая зона в форме сферы (Рис. 1). Рассмотрим двумерные волновые возмущения. Такая ситуация может реализоваться, например, при воздействии на систему граничным давлением ($p = p^0(r, t)$ при $z = z_0$, где R_{cl} - характерный радиус пузырьковой области, R_c - радиус канала, L_c - длина канала, ΔP_0 - амплитуда волны давления).

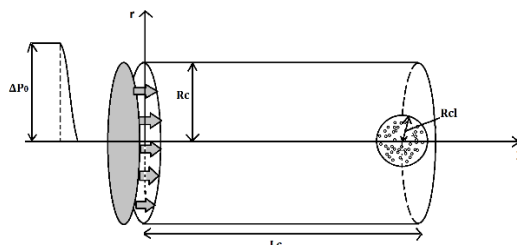


рис. 1. Схематическое изображение расчетной области

Для описания движения пузырьковой жидкости при обычных для таких систем допущениях примем систему, состоящую из уравнений масс, числа пузырьков, импульсов и давления в пузырьках в односкоростном приближении [1]:

$$\frac{d\rho_i}{dt} + \rho_i \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) = 0 \quad (i=l, g), \quad \frac{dn}{dt} + n \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) = 0, \quad \rho \frac{du}{dt} + \frac{\partial p_l}{\partial x} = 0, \quad \rho \frac{dv}{dt} + \frac{\partial p_l}{\partial y} = 0, \quad \rho = \rho_g + \rho_l,$$

$$\frac{dp_g}{dt} = -\frac{3\gamma p_g}{a} w - \frac{3(\gamma-1)}{a_0} q, \quad w = \frac{da}{dt}, \quad \left(\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + u \frac{\partial}{\partial x} + v \frac{\partial}{\partial y} \right), \quad \alpha_l + \alpha_g = 1, \quad \rho_i = \rho_i^0 \alpha_i, \quad \alpha_g = \frac{4}{3} \pi n a^3,$$

где a – радиус пузырьков, p_i – давления фаз, q – интенсивность теплообмена, n – число пузырьков в единице объема, w – радиальная скорость пузырьков, ρ_i^0 – истинные плотности фаз, γ – показатель адиабаты для газа, α_i – объемные содержания фаз. Скорости u и v соответствуют движению по координатам x и y . Нижними индексами $i=l, g$ отмечены параметры жидкой и газовой фаз.

В ходе численного эксперимента были получены результаты, представленные на рисунках 2 и 3. В расчетах радиус пузырькового кластера Rcl_i принимал следующие значения: 0.025м, 0.05м, 0.075м, 0.1м. Объемное содержание пузырьков в кластере $\alpha_i = (0.001, 0.0025, 0.005, 0.01, 0.02, 0.03, 0.04, 0.05)$. В расчетах начальный радиус пузырьков брался равны 1 мм. На рисунках представлены показания мнимых датчиков, которые располагались в середине пузырьковой области (рисунок 2) и на торцевой стенке за кластером на оси симметрии (рисунок 3).

Как видно из рисунков 2 и 3, можно подобрать такую комбинацию радиуса кластера и начального объемного содержания пузырьков, для известной амплитуде начального волнового воздействия, при которой возможно как ослабление, так и усиление волны давления при падении на торцевую твердую стенку (рисунок 3). Здесь стоит также отметить, что предмет, помещенный внутрь пузырьковой завесы, при определенных параметрах может быть защищен от внешнего волнового воздействия (рисунок 2).

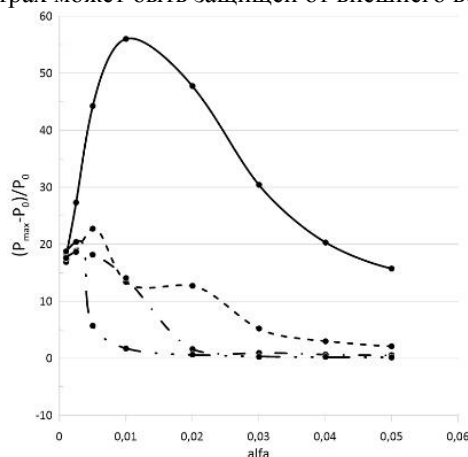


рис. 2. Максимальное отношение разности давлений к начальному давлению в центре завесы при радиусе завесы $Rcl = 0.025$ м. (сплошной), 0.05м. (пунктир), 0.075м. (точка-тире), 0.1 (тире две точки)

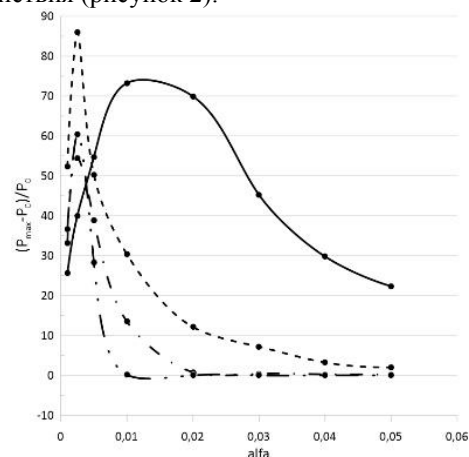


рис. 3. Максимальное отношение разности давлений к начальному давлению на дне канала при радиусе завесы $Rcl = 0.025$ м. (сплошной), 0.05м. (пунктир), 0.075м. (точка-тире), 0.1 (тире две точки)

Список публикаций:

- [1]. Нигматулин Р.И. Динамика многофазных сред. - М.: Наука, 1987, Т. 1, 2.
- [2]. Кедринский В.К. Гидродинамика взрыва: эксперимент и модели. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2000.
- [3]. Накоряков В.Е., Покусаев Б.Г., Шрейбер И.Р. Волновая динамика газо- и парожидкостных сред. — М.: Энергоатомиздат, 1990. — 248 с: ил.

Сравнение методов расчета движения твердого тела

Фатхуллин Артур Ильсурович

Челябинский государственный университет

Замоздра С. Н, к.ф.-м.н.

trickster.arthurr@gmail.com

Система уравнений движения твердого тела, представленного совокупностью N материальных точек, относительно неподвижной системы координат, содержит $N + 3$ векторных дифференциальных уравнений, а так же 2 или 1 алгебраическое уравнение. Прямое оперирование такой системой равным образом неудобно как

в аналитических решениях, так и при численном моделировании, что мотивирует использовать альтернативные, менее громоздкие подходы. Ныне применяются различные «вращательные формализмы» – наборы величин и правил оперирования с ними, однозначно задающих положение твердого тела. Это позволяет ограничить число дифференциальных уравнений ценой добавления алгебраических соотношений. В докладе представлены следующие методы описания вращения твердого тела:

1. «Непосредственный»: получающийся из законов механики [1], §31 и §34;
2. Углы Эйлера, напр. [1], §35 или [2] §2.5;
3. Вектор конечного поворота Родрига [2], §3.1;
4. Кватернионы [2], §3.2 или [3];
5. Матрицы поворота [2], §2.1 или [4];
6. Матрица поворота, составленная из компонент кватерниона – «комбинированный» [2], §3.2.

Цель работы – сравнить эти методы по скорости и точности.

С помощью методов 1, 3, 4, 5, 6 решалась задача о свободном вращении (без поступательного движения) твердого тела с $N=7000$. Тело вращается 1000 секунд модельного времени с начальной угловой скоростью $2\pi \frac{1000}{c}$, т. е. совершает ~ 1000 оборотов. Сравняются (см. таблицу) время счёта t и относительные погрешности δ расчета кинетической энергии E , длины радиус-вектора $\|\vec{r}\|$, определителя матрицы поворота Δ , модуля кватерниона $\|\mathbf{q}\|$. В методе (3) рассмотрено 2 варианта с разным ограничением на модуль вектора Родрига $\|\vec{\theta}\|$. Для удобства сравнения величины представлены в характерных единицах. Прочерк означает, что вычисление величины невозможно или нецелесообразно.

Величины		Метод					
Обозн.	Единица измерения	1	3 $\ \vec{\theta}\ < 3$	3 $\ \vec{\theta}\ < 10$	4	5	6
t	42.6 сек.	6.73	8.86	8.68	7.86	1	1
$\delta\Delta$	7E-5	-	2E-10	4.76E-10	1	1.78	1
$\delta\ \mathbf{q}\ $	4.63E-6	-	-	-	1	-	1
δE	2.52E-5	1.42	6.98	52.38	1	17.86	3.52
$\delta\ \vec{r}\ $	9.26E-6	1.58	1E-10	5.4E-10	1	1.44	1.08

Выводы

Метод (3) имеет наименьшую скорость расчета. При условии $\|\vec{\theta}\| < 10$ также хуже всех сохраняет энергию. При условии $\|\vec{\theta}\| < 3$ погрешность вычисления энергии уменьшается почти на порядок, при дальнейшем уменьшении максимального $\|\vec{\theta}\|$ практически не меняется. В обоих случаях, подход демонстрирует высочайшую точность сохранения длины вектора / определителя матрицы, характеризующей данное вращение – следствие того, что формула Родрига *всегда* задает чистый поворот, без растяжения.

Метод (4) немного медленнее метода (1), но лучше сохраняет энергию и длину вектора – отставание в скорости могло бы быть скомпенсировано выбором чуть большего шага.

Метод (5), при своих достоинствах – высокой скорости счета и уникальной возможности быстро рассчитать тензор инерции – сохраняет энергию в 17 раз хуже, чем (4), а остальные величины – примерно в 1.5 раза хуже, что может сделать его медленнее при интегрировании с переменным шагом.

Отсутствие однозначно лучшего подхода среди рассмотренных приводит к идее их комбинации. Метод (6) – матрица поворота, составленная из компонент кватерниона – сочетает быстроту расчета алгебраических соотношений и малую погрешность, претендуя на звание наилучшего в задаче о вращении твердого тела, представленного большим числом материальных точек.

Список публикаций:

[1] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика: Т.1 Механика. Москва: «Наука», 1988.

[2] Лурье А.И. Аналитическая механика. Москва: Физ. Мат. лит, 1961. Глава 3.

[3] Н.И. Амелькин. Кинематика и динамика твердого тела. <https://mpt.ru/upload/medialibrary/dc2/amlkin-n.i.-dinamika-tverdogo-tela.pdf>

[4] Fumio Hamano. Derivative of Rotation Matrix – Direct Matrix Derivation of Well-Known Formula. <https://arxiv.org/abs/1311.6010>

Моделирование движения деформируемых частиц в областях с детерминированным боковым смещением

Фахретдинова Алсу Леонидовна

Уфимский университет науки и технологий

Солнышкина Ольга Александровна, к.ф.-м.н.

A.L.Fakhretdinova@yandex.ru

Разделение частиц в области медицины и биологии является необходимым этапом в подготовительных и аналитических процессах. Так как в данном случае ведется работа с малыми объектами, на помощь приходят микрофлюидные устройства, где сортировка/разделение частиц возможны двумя методами: активными, которые основаны на внешних силовых полях (акустические, оптические и т.д.) и пассивными, полагающимися на геометрию канала и гидродинамические силы.

Данная работа посвящена одной из разновидностей пассивных методов – детерминированное боковое смещение (DLD), которое является механизмом для непрерывной сортировки по размеру и свойствам, например, деформируемости. Устройство состоит из периодического массива микростолбов различной геометрии, где горизонтальный ряд столбов смещается в сторону на заданное расстояние от предыдущего, что приводит к созданию отдельных гидродинамических потоков. Если частица больше, чем критический радиус, то она движется вместе с потоком, которое является ламинарным и описывается уравнением Стокса, а если меньше – смещается при каждом препятствии в направлении, определяемом устройством. С помощью данного метода в [1, 2] изучалось влияние пространственного расположения столбов, а в [3] – изменение доли сдвига на критический размер частиц.

Данная работа посвящена численному исследованию особенностей сортировки деформируемых частиц в потоке вязкой жидкости в микроканалах с DLD. Для численного моделирования используется метод граничных элементов, суть которого состоит в преобразовании дифференциального уравнения в частных производных, описывающее поведение неизвестной функции внутри и на границе области, в интегральное уравнение, связывающее только граничные значения, и нахождения численного решения этого уравнения.

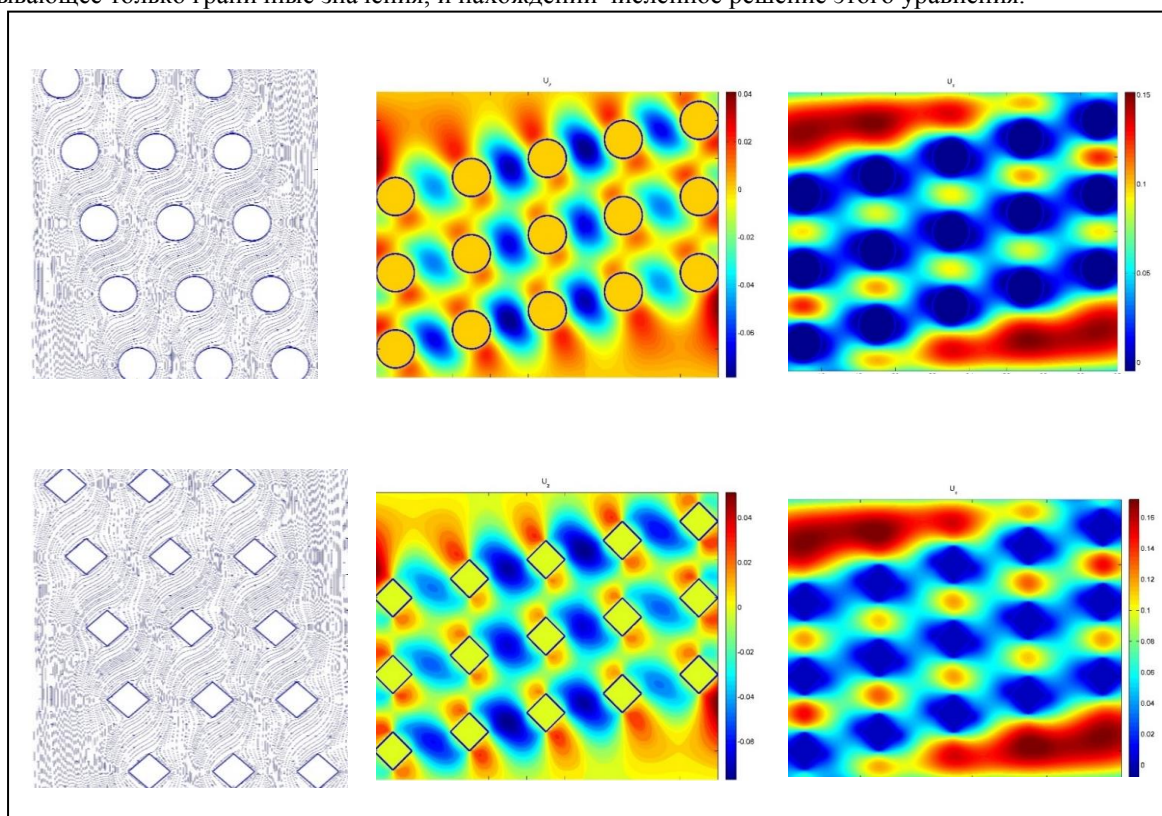


рис.1. Результаты моделирования для линий тока, продольной U_x и поперечной U_z составляющих скоростей (слева направо) в DLD структуре с круглыми и квадратными элементами.

В рамках данного исследования проведены расчеты течения вязкой жидкости в системе детерминированного бокового смещения с использованием ускоренного метода граничных элементов. Изучалось влияние совокупности параметров на поведение жидкости и траектории деформируемых частиц:

пространственное расположение и формы поперечного сечения столбов (квадрат и круг). Получены соответствующие картины течений, распределение продольной и поперечной скоростей при различных формах элементов (рис. 1).

Список публикаций:

- [1] Behnam Rezaei, Mahdi Moghimi Zand, Reza Javidi. Numerical simulation of critical particle size in asymmetrical deterministic lateral displacement // *Journal of Chromatography A*. - 2021 - 9.
 [2] Kerwin Kwek Zeming, Thoriq Salafi, Chia-Hung Chen, Yong Zhang. Asymmetrical Deterministic Lateral Displacement Gaps for Dual Functions of Enhanced Separation and Throughput of Red Blood Cells // *Scientific Reports*. – 2016.
 [3] David W. Inglis, John A. Davis, Robert H. Austin and James C. Sturm. Critical particle size for fractionation by deterministic lateral displacement // *Lab on a Chip*. - 2006. – p. 655-658.

Динамика волн давления в жидкости, содержащей пузырьковую зону полусферической формы

Юсупова Рушана Усмановна

Институт механики им. Р.Р. Мавлютова УФИЦ РАН

Галимзянов Марат Назипович, к.ф.-м.н.

rabota_ru333@mail.ru

Пузырьковые жидкости имеют особые свойства. При небольшом объемном содержании пузырьков среда, сохраняя плотность, близкую к плотности жидкости, приобретает большую сжимаемость, что приводит к нелинейности среды. Кроме того, пузырьковые среды, главным образом из-за проявления межфазного теплообмена, обладают сильными диссипативными свойствами. Совокупность взаимодействий нелинейных, дисперсионных и диссипативных эффектов вызывает научный интерес к особенности распространения волн в пузырьковой жидкости. К настоящему времени одномерные волны в пузырьковой жидкости хорошо изучены [1–3] и на данный момент активно исследуются двумерные волны. Особое внимание уделяется такой задаче волновой динамики в пузырьковой жидкости как взаимодействие ударной волны с пузырьковым кластером в жидкости.

Пусть в канале, заполненном жидкостью, находится прилегающая к одному из торцевых границ канала пузырьковая зона в форме полусферы (Рис. 1). Рассмотрим двумерные волновые возмущения. Такая ситуация может реализоваться, например, при воздействии на систему граничным давлением ($p = p^0(r, t)$ при $z = z_0$, где R_{cl} - характерный радиус пузырьковой области, R_c – радиус трубы, L_c – длина трубы, ΔP_0 – амплитуда волны давления).

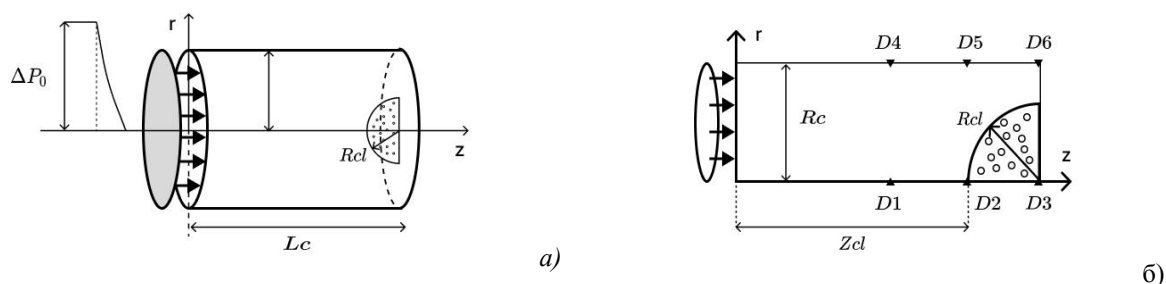


рис. 1. Схематическое изображение задачи (фрагмент а) и расчетной области (фрагмент б), D1-D6 датчики

Для описания движения пузырьковой жидкости при обычных для таких систем допущениях примем систему, состоящую из уравнений масс, числа пузырьков, импульсов и давления в пузырьках в односкоростном приближении [1]:

$$\frac{d\rho_i}{dt} + \rho_i \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) = 0 \quad (i = l, g), \quad \frac{dn}{dt} + n \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) = 0, \quad \rho \frac{du}{dt} + \frac{\partial p_l}{\partial x} = 0, \quad \rho \frac{dv}{dt} + \frac{\partial p_l}{\partial y} = 0, \quad \rho = \rho_g + \rho_l,$$

$$\frac{dp_g}{dt} = -\frac{3\gamma p_g}{a} w - \frac{3(\gamma-1)}{a_0} q, \quad w = \frac{da}{dt}, \quad \left(\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + u \frac{\partial}{\partial x} + v \frac{\partial}{\partial y} \right), \quad \alpha_l + \alpha_g = 1, \quad \rho_l = \rho_l^0 \alpha_l, \quad \alpha_g = \frac{4}{3} \pi n a^3,$$

где a – радиус пузырьков, p_i – давления фаз, q – интенсивность теплообмена, n – число пузырьков в единице объема, w – радиальная скорость пузырьков, ρ_i^0 – истинные плотности фаз, γ – показатель адиабаты

для газа, α_i - объемные содержания фаз. Скорости u и v соответствуют движению по координатам x и y . Нижними индексами $i=l, g$ отмечены параметры жидкой и газовой фаз.

В ходе численного эксперимента были получены результаты, представленные на рисунке 2. В расчетах радиус пузырькового кластера Rcl принимал следующие значения: 0,02м, 0,04м, 0,06м, 0,08м, 0,1м. Объемное содержание пузырьков в кластере α_{g0} принимались значения с 0,001 до 0,01 с шагом 0,001. В расчетах начальный радиус пузырьков брался равны 1 мм. Численные эксперименты проводились при следующих геометрических и теплофизических параметрах системы: $C_g = \frac{1006 \text{ Дж}}{\text{кг}} \cdot \text{К}$, $\rho_{g0} = 1,29 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$, $\lambda_g = 0,025 \text{ м} \cdot \frac{\text{Вт}}{\text{К}} \cdot \text{с}^{-2}$, $\gamma = 1,4$, $\rho_l = 1000 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$, $C_l = 1500 \frac{\text{Дж}}{\text{кг}} \cdot \text{К}$, $T_0 = 300 \text{ К}$, $p_0 = 0,1 \text{ МПа}$, $\Delta p_0 = 0,5 \text{ МПа}$, $R_c = 0,1 \text{ м}$, $h_{z0} = h_{r0} = 10^{-3} \text{ м}$, $\tau = 10^{-8} \text{ с}$. На рисунке представлены показания датчика D3, которые располагались на торцевой стенке за кластером на оси симметрии.

На рисунке 2 представлены расчетные осциллограммы, регистрируемые датчиком D3, иллюстрирующие динамику волны типа ступенька в трубе, заполненной жидкостью при наличии пузырькового кластера в форме полусферы. Из полученных результатов (левый график) видно, что даже для завесы с максимальным радиусом $Rcl_i = 0,1 \text{ м}$ происходит усиление воздействия на стенку и увеличение амплитуды до 2 МПа для объемного содержания в 1%. Стоит отметить, что в данном случае, с уменьшением радиуса присутствует тенденция к увеличению воздействия, хотя при этом максимальное воздействие происходит при $Rcl_i = 0,08 \text{ м}$. Заметим, что в данном случае максимальное воздействие достигается в первое воздействие на стенку, а в случае третьего взаимодействия. На правом графике видна иная картина. Максимальное воздействие фиксируется при радиусе кластера равного $Rcl = 0,04 \text{ м}$. Во всех остальных случаях видим усиление воздействия, но картины «не такие яркие». Проведя сравнение левого и правого рисунков можем заключить, что скорость распространения импульсного сигнала в пузырьковой существенно меняет картину течения. Если для объемного содержания пузырьков равного 1% пузырьковая область существенно демпфирует волновое возмущение, то для таких же геометрических размеров завеса с объемным содержанием 0,1%, наоборот, способствует увеличению амплитуды падающей на твердую стенку волны. Отсюда можно сделать вывод, что при волновом воздействии на твердую стенку, в зависимости от параметров (размеров пузырьковой зоны, объемного содержания газа в завесе, радиуса пузырьков) пузырьковая область может существенно уменьшить или увеличить воздействие импульсного сигнала.

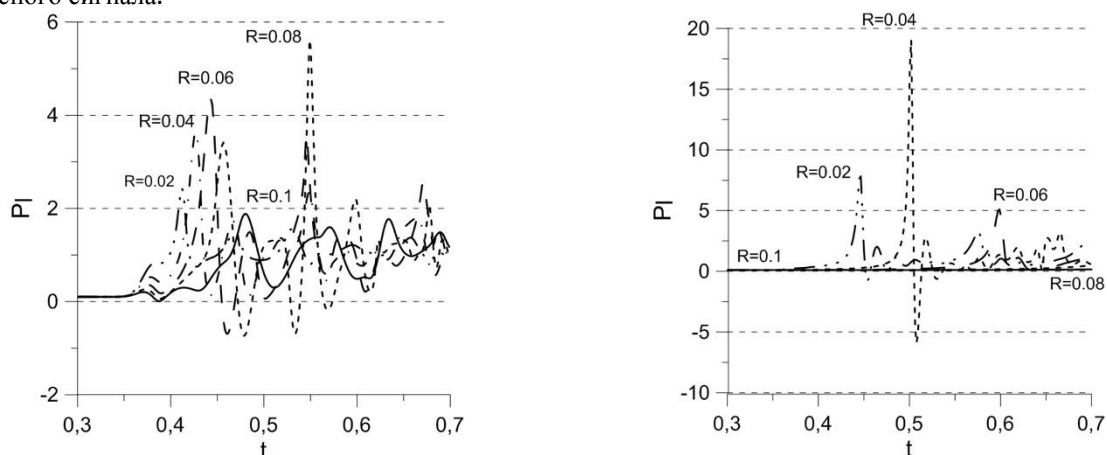


рис. 2. Показания датчика D3 (слева $\alpha_{g0} = 0,001$, справа – $\alpha_{g0} = 0,01$). Радиусе завесы $Rcl = 0,02 \text{ м}$. (тире-три точки), 0,04м. (точка-тире), 0,06м. (тире), 0,08 (пунктир), 0,1 (сплошная)

Список публикаций:

- [1]. Нигматулин Р.И. Динамика многофазных сред. - М.: Наука, 1987, Т. 1, 2.
- [2]. Кедринский В.К. Гидродинамика взрыва: эксперимент и модели. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2000.
- [3]. Накоряков В.Е., Покусавев Б.Г., Шрейбер И.Р. Волновая динамика газо- и парожидкостных сред. — М.: Энергоатомиздат, 1990. — 248 с: ил.

16 - Материаловедение. Физика кристаллов. Наноматериалы и композиты

Бронникова Юлия Ивановна, 4 курс

Ижевск, Удмуртский государственный университет, химии, физики и механики материалов

Условия образования перитектических микроструктур в сплавах Al-Cu-Co

Камаева Лариса Вячеславовна, к.ф.-м.н.

e-mail: yulya.bronnikova.2001@bk.ru стр. 231

Габбасов Радим Рифкатович, 4 курс

Уфа, Уфимский университет науки и технологий, физико-технический институт

Формирование твердофазных соединений из разноименных жаропрочных никелевых сплавов с разным фазовым составом

Эльвина Венеровна Галиева, к.т.н.

e-mail: Awesome.radim@yandex.ru стр. 232

Габдрахманова Лилия Айратовна, доцент

Уфа, Уфимский университет науки и технологий, физико-технический институт

Исследование дегидрирования водного сульфида натрия в вакууме

e-mail: la-gabdrahmanova@mail.ru стр. 253

Дмитриев Виктор Олегович, аспирант 3 года обучения

Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический

Изучение механизмов взаимодействия MeOx (Me=Cu, Ni) с графеноподобной плоскостью: рентгеновская спектроскопия поглощения

Яловега Галина Эдуардовна, д.ф.-м.н.

e-mail: vdmitriev@sfedu.ru стр. 234

Евграфов Артур Михайлович, магистрант 1 года обучения

Томск, Томский политехнический университет, инженерная школа новых производственных технологий

Получение оксида алюминия с наночастицами серебра на установке нанораспылительной сушки

Илела Алфа Эдисон, к.т.н.

e-mail: ame16@tpu.ru стр. 235

Классман Екатерина Юрьевна, аспирант 2 года обучения, инженер

Уфа, Институт проблем сверхпластичности металлов, лаб. 10

Низкотемпературная сверхпластичность никелевых сплавов ЭП975 и ЭК79 при испытаниях на одноосное сжатие

e-mail: klassman@mail.ru стр. 236

Константинов Алексей Сергеевич, аспирант 1 года обучения

Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический

Особенности динамики решетки твердых растворов BaхSr1-хTiO₃

Михейкин Алексей Сергеевич, к.ф.-м.н.

e-mail: alkons@sfedu.ru стр. 238

Митюшкин Евгений Олегович, 4 курс

Казань, Казанский (Приволжский) федеральный университет, институт физики

Гидротермальный синтез апконверсионных люминофоров NaYF₄:Yb, Er с заданными фотофизическими свойствами

Шмелев Артемий Геннадьевич, к.ф.-м.н.

e-mail: m1tyushck1n@yandex.ru стр. 239

Павленко Алексей Сергеевич, магистрант 1 года обучения

Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, Научно-исследовательский институт физики

Магнитодieleктрические свойства мультиферроика на основе ниобата натрия калия и феррита висмута в диапазоне температур (300-573)К

Мойса Максим Олегович

e-mail: alexey.pavlenkoxx@gmail.com стр. 240

Пикуль Анастасия Денисовна, 4 курс
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
Температуры магнитных фазовых переходов в твердых растворах $\text{Bi}_{1-x}\text{Nd}_x\text{Fe}_{0.25}\text{Cr}_{0.75}\text{O}_3$
Кубрин Станислав Петрович, к.ф.-м.н.
e-mail: nasta.pikul.34@gmail.com стр. 242

Подкин Егор Сергеевич, магистрант 2 года обучения
Екатеринбург, Уральский федеральный университет, ИМЕТ УрО РАН, Физико-технологический институт
Использование методов компьютерного зрения в металлографии алюминиевых сплавов
Котенков Павел Валерьевич, к.х.н.
e-mail: cherdancev_egor@mail.ru стр. 243

Полякова Полина Викторовна, магистрант 2 года обучения
Уфа, Уфимский государственный нефтяной технический университет, ИНИЦТ
Механические свойства многослойного графена при сжатии и растяжении: атомистическое моделирование
Баимова Юлия Айдаровна, д.ф.-м.н.
e-mail: polina.polyakowa@yandex.ru стр. 244

Спечев Юрий Владимирович, 1 курс
Красноярск, Сибирский федеральный университет, фундаментальной и прикладной химии
Исследование механизмов образования соединений Dy и Bi при синтезе многослойных наноструктур DyCo/Bi/NiFe
Косырев Николай Николаевич, к.ф.-м.н.
e-mail: yuryspechev@yandex.ru стр. 245

Степухов Егор Михайлович, 3 курс
Уфа, Уфимский университет науки и технологий, физико-технический институт
Формирование ультрамелкозернистой и нанокристаллической структуры в жаропрочных никелевых сплавах
Галиева Эльвина Венеровна, к.т.н.
e-mail: egorstepukhov@mail.ru стр. 246

Теплинская Анастасия Сергеевна, аспирант 1 года обучения
Красноярск, Сибирский федеральный университет, институт инженерной физики и радиоэлектроники
Тепловые свойства пористых кремниевых наноматериалов
Федоров Александр Семенович, д.ф.-м.н.
e-mail: anastasiateplinskaia@gmail.com стр. 247

Широбокова Анна Сергеевна, магистрант 1 года обучения
Ижевск, Удмуртский государственный университет, институт математики, информ-х технологий и физики
Исследование структуры и механических свойств жаростойких покрытий из металломатричных композиционных материалов на основе систем Co – SiC – ZrN
Харанжевский Евгений Викторович, д.т.н.
e-mail: anna362100@gmail.com стр. 248

Условия образования перитектических микроструктур в сплавах Al-Cu-Co

Бронникова Юлия Ивановна

Удмуртский государственный университет

Камаева Лариса Вячеславовна

yulya.bronnikova.2001@bk.ru

С помощью методов дифференциального термического анализа (ДТА), рентгено-структурного анализа и металлографии были исследованы условия образования и морфология твердых фаз при кристаллизации в контейнере сплавов Al-Cu-Co при 15 ат.% Co. Система Al-Cu-Co имеет стабильную квазикристаллическую фазу (D – фазу) с декагональной структурой. Согласно [1] D-фаза образуется по перитектической реакции и имеет область гомогенности 20-25 ат.% Cu и 15-20 ат. %Co. Существование таких фаз в твердом состоянии часто связывают с икосаэдрическим ближним порядком характерным для металлических расплавов. В связи с этим в работе для исследований был выбран следующий концентрационный интервал – 10-30 ат.% Cu, который включает как стехиометрию D-фазы, так и инвариантное превращение, при котором изменяется тип образующихся из расплава кристаллов.

В результате ДТА были получены кривые дифференциального термического анализа (термограммы). Данные зависимости получались при нагревании образцов со скоростью 20 град/мин до 1400 или 1500°C, выдержке при этой температуре в течение 20 минут и охлаждения со скоростью 100 град/мин. По данным ДТА определяли температуры всех этапов плавления (в режиме нагрева) и кристаллизации (в режиме охлаждения). По разности температур ликвидус и температуры начала кристаллизации определяли величину переохлаждения. Для каждого образца проводились серии измерений, состоящих из нескольких циклов нагрев (плавление) – охлаждение (кристаллизация). В них варьировались либо максимальная температура, до которой нагревали расплав, либо скорость. Исследования проводились при скоростях охлаждения 20, 50 и 100 С/мин. Далее все полученные данные были использованы для построения зависимости переохлаждения, в условиях которого начинается кристаллизация. Фазовый анализ образцов после затвердевания в условиях ДТА исследовали рентгеноструктурным методом. Анализ микроструктур и изучение морфологии образующихся кристаллов проводили металлографией.

ДТА в режиме нагрева показал, что для всех сплавов наблюдается протяженная двухфазная область, а разница температур между солидусом и ликвидусом зависит от концентрации и изменяется в пределах от 500 до 800 С. Количество пиков на ДТА кривой нагрева зависит от концентрации Cu и варьируется в пределах от 2 до 7. Сплавы при 15 ат.% Co, с содержанием Cu от 10 до 17.5 ат.% на термограммах нагрева имеют выраженный пик, указывающий на эвтектическое плавление с большим тепловым эффектом. Остальные небольшие пики указывают на различные перитектические превращения. По полученным результатам термограмм нагрева были построены концентрационные зависимости температур фазовых превращений, которые являются основой для построения соответствующих концентрационных срезов диаграммы состояния. Построенная линия ликвидус имеет перегиб при концентрации, на которой происходят изменения типа плавящейся твердой фазы: при варьировании концентраций Al и Cu и 15 ат.% Co перегиб наблюдается в области 20 ат.% Cu и соответствует инвариантному превращению $Al13Co4+L \rightarrow \beta+L$.

По термограммам охлаждения исследуемых образцов, при скоростях охлаждения 100 град/мин от различных температур были определены температуры начала кристаллизации для исследуемых сплавов. Анализ термограмм показывает, что кристаллизация сплавов начинается в условиях небольших переохлаждений и зависит от концентраций и скоростей охлаждения. Данные указывают на то, что скорость охлаждения влияет на величину переохлаждения, при которой начиналась кристаллизация, а также на последовательность и характер стадий кристаллизации, то есть при повышении скорости охлаждения уменьшается температура начала кристаллизации и, соответственно, увеличивается величина переохлаждения. Обнаруженные особенности на концентрационной зависимости переохлаждения хорошо согласуются с общим изменением характера кристаллизации (видом термограмм охлаждения), и имеют более сложный вид, чем линия ликвидус.

РСА и металлография показали, что конечная микроструктура сплавов определяется серией перитектических превращений, протекающих при их охлаждении. Однако при небольших содержаниях Cu образующаяся микроструктура содержит следы эвтектической кристаллизации, характерной для заэвтектических сплавов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-22-00912, <https://rscf.ru/project/22-22-00912/>

Список публикаций:

[1]Wu Z.W., Li F.X., Huo C.W., Li K.X. // *Critical scaling of icosahedral medium-range order in CuZr metallic glass-forming liquid* // *Scientific Reports*. 2016. V. 6, pp. 35967.

Формирование твердофазных соединений из разноименных жаропрочных никелевых сплавов с разным фазовым составом

Габбасов Радим Рифкатович

Галиева Эльвина Венеровна, Габбасов Радим Рифкатович, Класман Екатерина Юрьевна

Уфимский университет науки и технологий

Галиева Эльвина Венеровна, к.т.н.

Awesome.radim@yandex.ru

Жаропрочные никелевые сплавы (ЖНС) находят широкое применение в авиационной промышленности. Например, в авиационных двигателях, около 50% деталей изготавливаются из ЖНС. Высокие эксплуатационные свойства обусловлены сложным химическим составом сплавов, что, в свою очередь, снижает технологическую пластичность и ухудшает обрабатываемость [1]. В связи с этим для изготовления биметаллических деталей из указанных сплавов целесообразно использовать эффект сверхпластичности. Одним из более перспективных способов получения соединений в твердом состоянии является сварка давлением в условиях сверхпластичности, которая позволяет соединять не только однородные, но и разнородные материалы [2].

В связи с вышеизложенным данная работа посвящена исследованию влияния фазового состава жаропрочных деформируемых никелевых сплавов на формирование твердофазного соединения методом сварки давлением с использованием сверхпластической деформации. В работе был проведен сравнительный анализ структуры и свойств твердофазных соединений.

Материалами для исследований были выбраны жаропрочные деформируемые никелевые сплавы с различным фазовым составом ($\gamma+\gamma'$ - и $\gamma+\delta$ - фазы). Сварку давлением образцов из сплавов с одинаковым фазовым составом (пара 1) проводили при температуре 1100°C, а с разным фазовым составом в сочетании ЭК61//ЭП975 (пара 2) при температуре 925°C. Для создания вакуума образцы перед испытанием помещали в герметичный контейнер из нержавеющей стали. Исходная структура сплавов пары 1 представляла собой мелкозернистую (МЗ) структуру с размером зерен γ -фазы 5-8 мкм, а γ' -фазы 3-5 мкм. Исходная структура сплавов пары 2 представляла собой мелкозернистую (сплав ЭП975) с размером зерен γ -фазы 7-8 мкм, а γ' -фазы 4-5 мкм и ультрамелкозернистую для сплава ЭК61 с размером зерен γ -фазы и δ -фазы 0,8 мкм. Прочность сварных образцов оценивали по результатам механических испытаний на растяжение при комнатной температуре на испытательной машине INSTRON со скоростью перемещения траверсы 0,5 мм/мин.

По данным энергодисперсионного анализа установлено, что при сварке образцов как в паре 1, так и в паре 2 химический состав в зоне соединения является промежуточным между соединяемыми сплавами. Ширина диффузионной зоны составляет 20-40 мкм. По результатам исследований обнаружено, что в паре 1 в обоих сплавах сохраняется МЗ структура дуплексного типа. В зоне соединения наблюдается формирование общих зерен. В паре 2 мелкозернистая структура сплава ЭП975 сохраняется, а ультрамелкозернистая структура сплава ЭК61 трансформируется в мелкозернистую. По данным механических испытаний на растяжение установлено, что прочность твердофазного соединения пары 2, составляет 0,55 от прочности сплава ЭК61. Прочность сварных образцов пары 1 выше, и составляет 0,62 от прочности сплава ЭК79.

Таким образом, метод сварки давлением в условиях сверхпластичности в сочетании разноименных жаропрочных никелевых сплавов с различным типом упрочняющей фазы с мелкозернистой и ультрамелкозернистой структурой является эффективным методом получения модельных сварных образцов.

Работа в части исследования сварки давлением ЭК61//ЭП975 выполнена при финансовой поддержке Совета по грантам Президента Российской Федерации (Стипендия Президента РФ молодым ученым и аспирантам СП-4002.2022.1).

Список публикаций:

[1] Симс, Ч. *Жаропрочные материалы для аэрокосмических и промышленных энергоустановок.* // Ч. Симс, Т. Столофф, В. Хагель; в 2-х кн. – пер. с англ. М.: Металлургия. 1995. 568 с.

[2] E.V. Galieva, R.Ya. Lutfullin, A. Kh. Akhunova, V. A. Valitov, S. V. Dmitriev *Effect of surface relief on solid phase joining of heat-resistant nickel superalloys* // *Science and technology of welding and joining*. 2018. V. 23, N 7. P. 612–618.

Исследование дегидрирования водного сульфида натрия в вакууме
Габдрахманова Лилия Айратовна
Алексеева Кристина Васильевна, Давлетшина Алиса Данисовна, Казакбаев Айдар Рушанович
Уфимский университет науки и технологий
Альмухаметов Рафаил Фазыльянович, д.ф.-м.н.
la-gabdrahmanova@mail.ru

Гидраты сульфида натрия ($\text{Na}_2\text{S}\cdot n\text{H}_2\text{O}$, $n=0-9$) представляют большой практический интерес как термохимические материалы с высокой удельной емкостью для накопления тепловой энергии. Средняя теплота дегидратации $\text{Na}_2\text{S}\cdot 5\text{H}_2\text{O}$ до Na_2S составляет около 300 кДж на моль Na_2S . Кроме этого безводный сульфид натрия представляет интерес как один из компонентов при синтезе химических соединений.

В зависимости от температуры и давления водяных паров дегидратация сульфидов $\text{Na}_2\text{S}\cdot n\text{H}_2\text{O}$ происходит по различным схемам. При остаточном давлении водяных паров $P > 0.27$ атм. дегидратация идет по схеме [1]: $\text{Na}_2\text{S}\cdot 9\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{Na}_2\text{S}\cdot 8\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{Na}_2\text{S}\cdot 5\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{Na}_2\text{S}\cdot 3\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{Na}_2\text{S}\cdot 2\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{Na}_2\text{S}\cdot \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{Na}_2\text{S}$.

При уменьшении остаточного давления отдельные стадии реакций не наблюдаются. Разными авторами проведены исследования кристаллической структуры различных модификаций гидратов сульфида натрия, определены области стабильности в зависимости от температуры и остаточного давления водяных паров [2-4]. В имеющихся работах исследования проведены в атмосфере гелия, смеси азота с водородом, либо при невысоком вакууме. Несмотря на это в литературе недостаточно сведений о термической стабильности гидратированного сернистого натрия. Целью нашей работы являлось изучение механизмов дегидратации сульфида натрия $\text{Na}_2\text{S}\cdot 9\text{H}_2\text{O}$, а также получение безводного моносульфида Na_2S .

В данной работе дегидратацию сульфида натрия ($\text{Na}_2\text{S}\cdot n\text{H}_2\text{O}$, $n=0-9$) проводили в вакууме порядка $10^{-3}-10^{-4}$ мм рт. ст. В качестве исходного материала использовали 9-ти водный сульфид натрия марки ч.д.а. Давление в камере измеряли с помощью датчика ПМТ-2. Температуру измеряли с помощью термопары хромель-алюмель. Рентгеноструктурные исследования проводили с помощью дифрактометра ДРОН-7 на $\text{Co K}\alpha$ -излучении. С целью предотвращения поглощения образцами влаги и углекислого газа из атмосферы в качестве связующей при съемке дифрактограмм использовали обезвоженный медицинский вазелин. Микроструктуру изучали на растровом электронном микроскопе TESCAN MIRA.

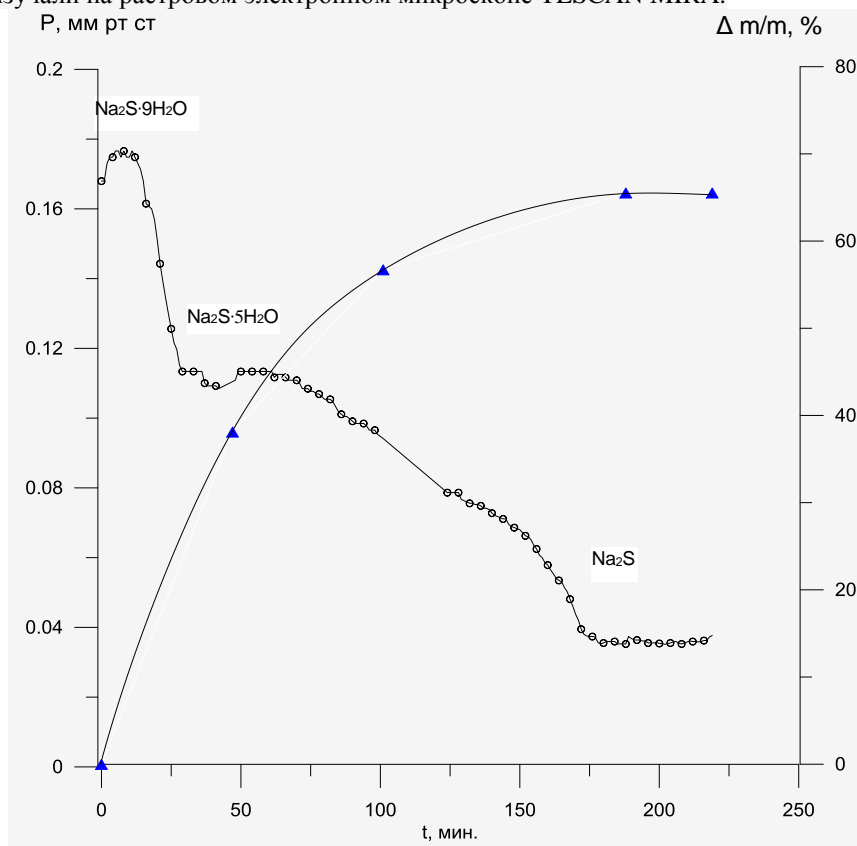


рис. 1 Зависимость остаточного давления водяных паров и массы образца от времени дегидратации при $T=57^\circ\text{C}$

Рентгеновский фазовый анализ показал, что исходный материал содержит в основном линии $\text{Na}_2\text{S}\cdot 9\text{H}_2\text{O}$ и $\text{Na}_2\text{S}\cdot 5\text{H}_2\text{O}$. После дегидрирования в вакууме исследуемый образец состоял из моносульфида натрия. Полученные нами рентгеновские данные хорошо согласуются с табличными. Кристаллы безводного сульфида натрия Na_2S имеют правильную форму октаэдра. Электронно-микроскопическое изображение поверхности кристаллов имеет пористую структуру. Результаты индирования дифрактограмм показали, что полученный нами моносульфид натрия Na_2S имеет ГЦК структуру с параметром решетки $a = 6.5295 \text{ \AA}$. Расчетные межплоскостные расстояния хорошо согласуются с экспериментальными, что свидетельствует о корректном индировании дифрактограмм.

Нами установлено, что на зависимостях давления насыщенных паров воды от времени дегидратации наблюдаются четкие особенности (рис. 1). Мы полагаем, что эти особенности связаны с удалением определенной группы кристаллизационной воды. Наши данные согласуются с результатами исследований работы [1], в которой дегидратацию изучали в потоке инертного газа. Согласно результатам наших исследований реакция дегидратации идет по схеме: $\text{Na}_2\text{S}\cdot 9\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{Na}_2\text{S}\cdot 5\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{Na}_2\text{S}$.

Для подтверждения наших предположений и для определения состава образцов в ходе дегидратации регулярно определяли их вес. Из рис. 1 видно, что после дегидратации в течение 200 минут при $T=57^\circ\text{C}$ вес образца не меняется и соответствует составу Na_2S . Однако в работе [1] сообщается, что разложение $\text{Na}_2\text{S}\cdot \text{H}_2\text{O}$ до Na_2S в потоке азота происходит только при температурах выше 400°C . Из рис. 4 также видно, что реакция $\text{Na}_2\text{S}\cdot 5\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{Na}_2\text{S}$ происходит уже при температурах порядка $T=57^\circ\text{C}$. Согласно результатам [1] данная реакция происходит при температурах выше $T=130^\circ\text{C}$.

Установлено, что зависимостях остаточного давления водяных паров от времени дегидратации наблюдаются особенности в виде горизонтальных участков, связанные с удалением определенной группы кристаллизационной воды. Показано, что температура дегидратации сульфидов натрия ($\text{Na}_2\text{S}\cdot n\text{H}_2\text{O}$, $n=0-9$) при понижении давления снижается.

Список публикаций:

- [1] R. C. Kerby and M. R. Hughson. *Thermal Decomposition of Hydrated Sodium Sulphide*. Department of Energy, Mines and Resources Mines Branch. Ottawa. Extraction Metallurgy Division. April 1973 Research Report R 262.
- [2] R. de Boer, W.G. Haije, J.B.J. Veldhuis. *Determination of structural, thermodynamic and phase properties in the $\text{Na}_2\text{S}-\text{H}_2\text{O}$ system for application in a chemical heat pump* // *Thermochimica Acta* 395 (2003) 3–19.
- [3] Joseph P. Copes, Easton, Pa., and Clyde McKinley, Bevidere, N.J. *Dehydration of Sodium Sulfide*. US Patent No. 2,533,163.
- [4] N.I. Kopylov, Yu.V. Kaminski, *Russ. J. Inorg. Chem.* 44 (2) (1999) 261.
- [5] M. Roelands, R. Cuypers, K. D. Kruit, H. Oversloot, Ard-Jan de Jong, W. Duvalois, L. Vliet, C. Hoegaerts. *Energy Procedia* 70 (2015) 257 – 266/

Изучение механизмов взаимодействия MeOx ($\text{Me}=\text{Cu}, \text{Ni}$) с графеноподобной плоскостью: рентгеновская спектроскопия поглощения

Дмитриев Виктор Олегович

Стеблецова Елена Сергеевна, Шматко Валентина Анатольевна

Южный федеральный университет

Яловега Галина Эдуардовна, д.ф.-м.н.

vdmitriev@sfedu.ru

Благодаря уникальным физико-химическим свойствам композиты на основе оксидов переходных металлов и углеродных наноматериалов могут использоваться в качестве катализаторов, сенсоров, суперконденсаторов. Свойства композитов могут зависеть от взаимодействия атомов металла и углерода. Целью работы было исследование механизмов взаимодействия оксидов переходных металлов (Cu, Ni) с графеновой сеткой, методом ближней тонкой структуры рентгеновского поглощения NEXAFS.

Анализ экспериментальных спектров рентгеновского поглощения за К-краем углерода, никеля и меди композитов CuOx/УНТ и NiOx/УНТ показал, что локальная структура окружения меди в композите соответствует CuO [1, 3], а никеля - Ni(OH)_2 [2].

Проведено моделирование возможных механизмов взаимодействия никеля и меди с графеновой сеткой и расчёт спектров рентгеновского поглощения за К-и $L_{2,3}$ - краями меди и никеля. Теоретический анализ спектров NEXAFS проводился с использованием программного комплекса FDMNES в полном потенциале, методом многократного рассеяния. Были построены различные структурные модели взаимодействия атомов меди и никеля, а также кластеров CuO и NiO , с графеновой плоскостью и для них рассчитаны теоретические спектры NEXAFS. Рассмотрены три возможных модели взаимодействия: атомный кластер со структурой NiO и

CuO располагался на центре углеродного гексагона, над его вершиной и связью углерод-углерод. На основе согласия экспериментальных и теоретических спектров определены наиболее вероятные пути связывания оксидов никеля и меди с графеновой сеткой. Результаты подтверждают, что наиболее вероятно в процессе создания композита никель и медь образуют кластеры NiO и CuO, взаимодействующие с углеродной стенкой трубки. Тенденцию к согласию теоретических результатов с экспериментальными данными имеют модели, в которых оксиды переходных металлов располагается над центром связи углерод-углерод.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-22-00459.

Список публикаций:

[1] V.A. Shmatko, A.A. Ulyankina, N.V. Smirnova, G.E. Yalovega. X-Ray Spectral Studies of the Interface Interaction in CuOx/MWCNTs Nanocomposite // *Optics and Spectroscopy*. 2018. Vol. 124 (4). P. 478-482.

[2] V. Shmatko, D. Leontyeva, N. Nevzorova, N. Smirnova, M. Brzhezinskaya, G. Yalovega. Interaction between NiOx and MWCNT in NiOx/MWCNTs composite: XANES and XPS study // *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*. 2017. Vol. 220. P. 76-80.

[3] V. Shmatko, G. Yalovega, A. Barbashova, A. Kuriganova, E. Bogoslavskaya, N. Smirnova. Investigation of the Morphological, Atomic and Electronic Structural Changes CuOx Nanoparticles and CNT in a Nanocomposite CuOx/CNT: SEM and X-ray Spectroscopic Studies // *Key Engineering Materials*. 2016. Vol. 683. P. 215-220.

Получение оксида алюминия с наночастицами серебра на установке нанораспылительной сушки

Евграфов Артур Михайлович

Лямина Галина Владимировна, Черемнов Андрей Максимович

Томский политехнический университет

Илела Алфа Эдисон, к.т.н.

ame16@tpu.ru

Известно, что серебро имеет сильные антимикробные свойства. Ограниченное использование его в медицине, как аналог антибиотиков, связан с токсичностью данного металла [1]. Решить данную проблему позволяют технологии нанесения серебра на инертные носители, инкапсулирование активного компонента и пр. В нашей работе мы предлагаем использовать для этих целей аппарат нанораспылительной сушки, позволяющий получать сферические частицы с размерами кристаллитов нанометрового масштаба при низких температурах. Применение такого подхода позволяет в одну стадию получать частицы, содержащие два и более веществ, при этом состав продукта контролируется значительно точнее, за счет отсутствия селективности при выделении из многокомпонентного раствора [2, 3]. В качестве инертного носителя выбран оксид алюминия.

Частицы выделяли из суспензии методом распылительной сушки с последующей термообработкой. Суспензии получали обратным осаждением в 10%-м гидроксиде аммония из раствора 0,1 М Al(NO₃)₃ и 0,001 М AgNO₃.

По ПЭМ-изображениям (рис. 1) видно, что частицы имеют форму полый или частично заполненной сферы со средним размером кристаллитов 39 ± 3 нм.

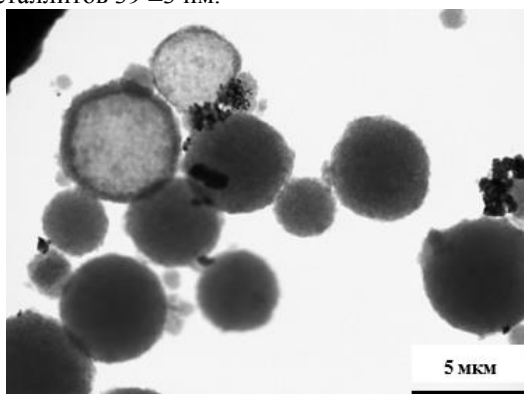


рис. 1 ПЭМ-изображение частиц Al₂O₃ – Ag, после термообработки при 300°C со скоростью 12 К/мин

Добавление серебра в суспензии приводит к изменению ДСК-кривой нитрата алюминия (рис. 2, а). Эндозффекты при 82 и 289 °С, при 90 и 273 °С, соответственно, отвечают удалению остатков свободной и связанной воды. Согласно ТГ-кривым порошок теряет при этом около 24 % своей массы. При дальнейшем нагреве начинают последовательно образовываться фазы AlOOH, γ и α-Al₂O₃, чему соответствуют широкие

диффузные экзоэффекты начиная от 650 °С и до конца регистрации: 1200 °С. Большой экзоэффект, наблюдающийся для системы с серебром, объясняется взаимным влиянием компонентов на температуру кристаллизации. Таким образом термообработку порошков, приводящую к превращению гидроксидов в оксиды следует проводить при температуре не выше 700 °С.

На рис. 2 показано, что при таких условиях образуется γ - Al_2O_3 – Ag, а часть продукта остается в аморфном состоянии. Такие частицы удобны для использования в фармакологии, так как сохраняют большую удельную поверхность, необходимую для высвобождения лекарства.

В работе была опробована методика получения композиционных частиц с использованием нанораспылительной суши. Показано, что получаемые сферические частицы размером 2,5 мкм имеют состав γ - Al_2O_3 – Ag и состоят из кристаллитов со средним размером 39 нм.

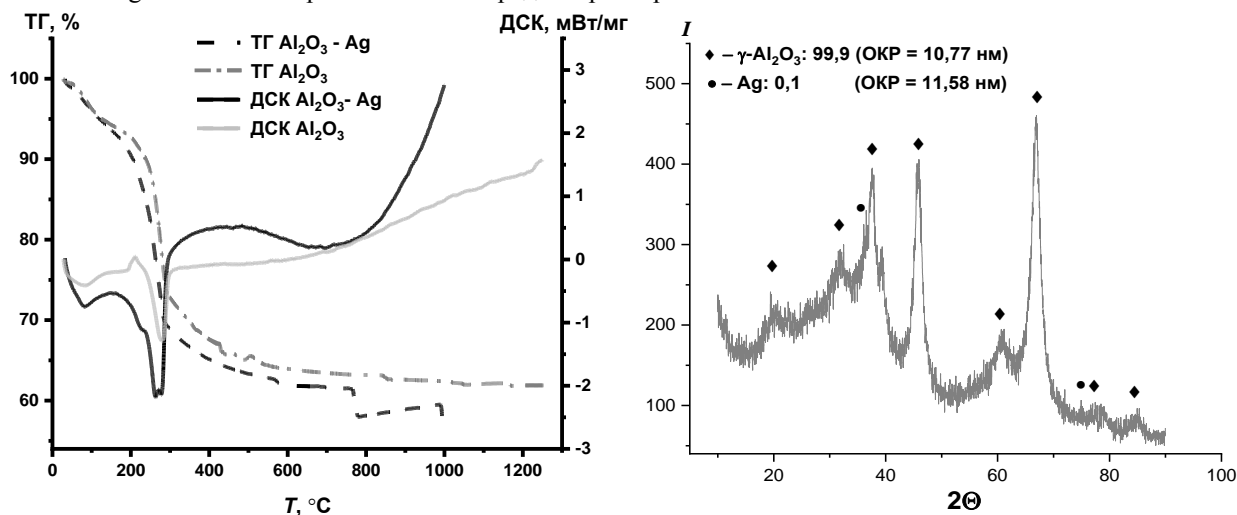


рис. 2 ТГ - ДСК кривые (а) и дифрактограммы (б) порошков, полученных из суспензий методом распылительной суши; РФА выполнен для порошка после термообработки при 700 °С

Работа выполнена на оборудование ЦКП НОИЦ НМНТ ТПУ, поддержанного проектом Минобрнауки России № 075-15-2021-710.

Список публикаций:

- [1] Mehran Alavi, Masoud Moradi. // *Inorganic Chemistry Communications*. - 2022. - P. 1-9.
- [2] Lyamina, G.V. Iela, A.E., Dvilis E.S., Petykevich M.S. // *Nanotechnologies in Russia*. - 2018. -Vol.13. -p. 333 - 339.
- [3] Лямина Г.Б., Илела А.Э. Качаев А.А. // *Бутлеровские сообщения*. 2013. Т.33. №2. С.119-124.

Низкотемпературная сверхпластичность никелевых сплавов ЭП975 и ЭК79 при испытаниях на одноосное сжатие

Классман Екатерина Юрьевна

Классман Екатерина Юрьевна, Галиева Эльвина Венеровна

Институт проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук

klassman@mail.ru

Современные жаропрочные сплавы имеют сложный химический состав, включающий более 10 легирующих элементов [1]. Сплавы ЭП975 и ЭК79 с упрочняющей γ' -фазой $\text{Ni}_3(\text{Al},\text{Ti})$, которая при охлаждении выделяется практически мгновенно и имеет одинаковую с матрицей (γ -фазой) кристаллическую ГЦК решетку и очень малый параметр несоответствия решеток, имеют низкую технологическую пластичность [1]. Поэтому для изготовления деталей из жаропрочных никелевых сплавов целесообразно применение перспективной технологии сверхпластической деформации, что, в свою очередь, возможно за счет получения в этих сплавах ультрамелкозернистой (УМЗ) структуры. В результате проведения деформационно-термической обработки (ДТО) с использованием преимущественно схемы всесторонней-изотермической ковки (ВИК) и поэтапным снижением температуры обработки достигается измельчение структуры, вплоть до УМЗ состояния. Кроме того, в некоторых никелевых сплавах формирование УМЗ структуры обеспечивает снижение температуры проявления сверхпластичности (СП) по сравнению с мелкозернистым состоянием [2].

Для получения УМЗ структуры использовали заготовки с мелкозернистой структурой типа микродуплекс: средний размер зерен γ -фазы составляет 6-8 мкм, а крупных некогерентных частиц-зерен упрочняющей γ' -фазы 2-3 мкм. Внутри зерен γ -фазы присутствуют дисперсные (0,2-0,4 мкм) частицы γ' -фазы, которые обычно выделяются при охлаждении с температуры штамповки до комнатной температуры. Доля микродуплексной составляющей в сплавах ЭП975 и ЭК79 превышает 50-70%.

В сплавах ЭП975 и ЭК79 ДТО с использованием схемы ВИК привела к формированию УМЗ структуры смешанного типа: как для сплава ЭК975, так и для сплава ЭК79 можно выделить два вида размеров частиц γ' -фазы: относительно крупные – «наследственные» от микродуплексной структуры и УМЗ составляющая - некогерентные выделения γ' -фазы. Доля наследственных выделений γ' -фазы в сплаве ЭП975 составляет примерно 13 %, а в сплаве ЭК79 - 10 %. Размер зерен γ -фазы в сплаве ЭП975 ~0,5 мкм (Рис. 1а), а в сплаве ЭК79 ~0,3 мкм (Рис. 1б). Низкая плотность дислокаций в зернах γ -фазы и сохранение их равноосности свидетельствует о развитии при ДТО механизмов сверхпластической деформации, в частности основного механизма – зернограничного проскальзывания.

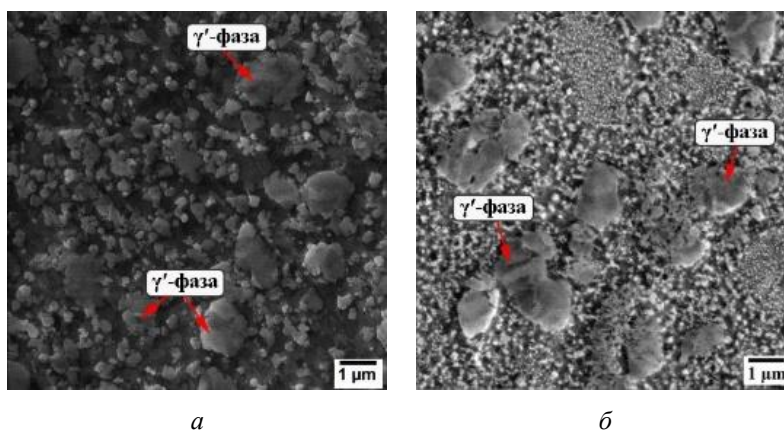


рис.1. УМЗ микроструктура сплавов после проведения ДТО: а – ЭП975, б – ЭК79

Результаты механических испытаний на сжатие исследуемых сплавов представлены в рисунке 2. В сплаве ЭП975 максимальные значения степени деформации (~69 %) проявляются при температуре 1000°C и скорости деформации 10^{-3} c^{-1} , значения напряжений течения при этом ~265 МПа. В сплаве ЭК79 с УМЗ структурой режим СП по схеме одноосного сжатия реализуется в интервале температур от 900°C и выше и скоростей деформации 10^{-3} c^{-1} - 10^{-2} c^{-1} (Рис. 2а). Максимальные значения степени деформации (~69-71 %) наблюдаются в интервале температур 900-1000 °C и скоростей 10^{-3} c^{-1} - 10^{-2} c^{-1} (Рис. 2б).

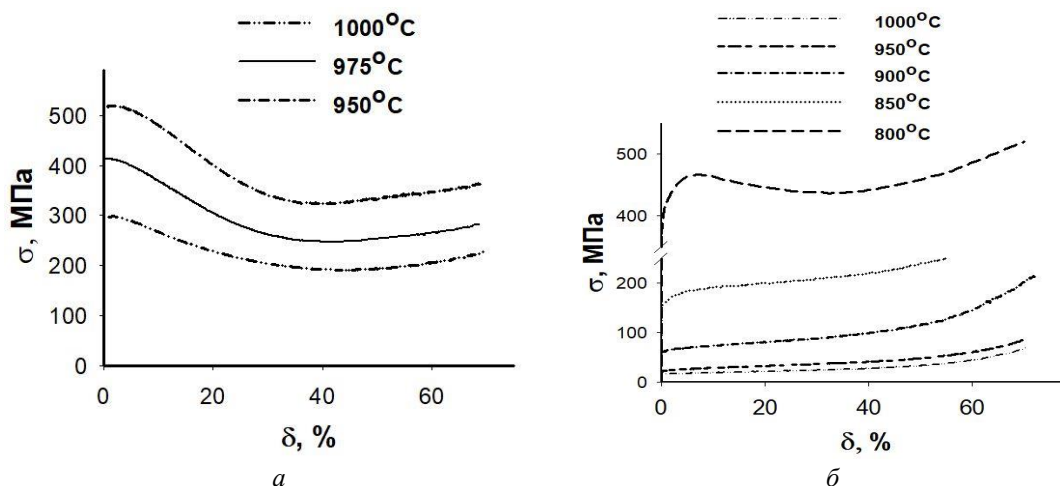


рис.2. Механические свойства при испытаниях по схеме одноосного сжатия со скоростью 10^{-3} c^{-1} : а) – ЭП975, б) – ЭК79

Анализ микроструктуры показал, что повышение температуры деформации до 1000 °C приводит к укрупнению зерен γ -фазы. Это происходит вследствие воздействия высоких температур и частичного растворения более мелких (менее 1 мкм) частиц γ' -фазы. Фактически, при указанной температуре деформации УМЗ структура начала трансформироваться в МЗ структуру.

Таким образом, в сплавах ЭП975 и ЭК79 в условиях низкотемпературной деформационно-термической обработки формируется смешанная ультрамелкозернистая структура. Вероятно, температуры обработки являются низкими, а степень деформации и время, в течение которого формируется УМЗ структура, недостаточны для того, чтобы обеспечить формирование УМЗ структуры во всем объеме материала, что обуславливает формирование смешанной УМЗ структуры. Сохранение в УМЗ структуре относительно крупных некогерентных частиц второй фазы (γ' -фазы) в изученных сплавах, унаследованных от микродуплексной структуры, связано, по-видимому, с тем, что деформация локализуется в УМЗ составляющей. Однако формирование такой смешанной структуры во всем объеме жаропрочного никелевого сплава независимо от типа упрочняющей фазы является достаточным условием для обеспечения явления низкотемпературной СП. Работа выполнена в рамках проекта РНФ № 22-79-00271. Микроструктурные исследования осуществляли на оборудовании Центра Коллективного Пользования ИПСМ РАН.

Список публикаций:

[1] Лозунов А.В. Жаропрочные никелевые сплавы для лопаток и дисков газовых турбин. М.: ООО «Издательский дом «Газотурбинные технологии», 2017. 854 с.

[2] Валитов В.А. Деформационно-термическая обработка - эффективный метод получения ультрамелкозернистой и нанокристаллической структуры в никелевых сплавах // Письма о материалах. 2013. Т.3. С. 50-55.

Особенности динамики решетки твердых растворов $Ba_xSr_{1-x}TiO_3$

Константинов Алексей Сергеевич

Южный федеральный университет

Михейкин Алексей Сергеевич

alkons@sfedu.ru

Сегнетоэлектрические материалы широко применяются в различных устройствах благодаря комбинации уникальных свойств. Тем не менее, потенциал применения сегнетоэлектриков в перестраиваемых устройствах микроволнового диапазона существенно ограничено наличием доменной структуры. Сегнетоэлектрические домены вносят сложности в процесс получения материалов с контролируемыми диэлектрическими свойствами. Исходя из этого, актуальным видится применение сегнетоэлектриков с температурой Кюри гораздо ниже комнатной, что обеспечит предсказуемое поведение диэлектрической проницаемости в стандартном рабочем диапазоне. Важным свойством подобных материалов является существование мягкой моды, которая несёт в себе информацию о структурном фазовом переходе. Таким образом, интерес к исследованию динамики кристаллической решетки сегнетоэлектрических материалов обусловлен изменением свойств материалов в результате фазовых переходов и соответствующим им структурным преобразованиям.

Титанат бария-стронция $Ba_xSr_{1-x}TiO_3$ (BST) широко известен благодаря возможности контролировать температуру фазового перехода изменяя концентрацию катионов стронция. Целью данной работы являлось изучение динамики решетки BST с содержанием $x(Ba) = 0.3$ посредством колебательной спектроскопии комбинационного рассеяния света (КРС) и сравнение полученных данных с твердыми растворами BST с $x(Ba) = 1$ и 0.5 . Спектры КРС были получены в широком диапазоне температур: от 77 до 460 К, что позволило идентифицировать температуры всех фазовых переходов. Полученные температуры фазовых переходов были сравнены с теоретической фазовой диаграммой системы твердых растворов BST. С увеличением концентрации стронция температурные диапазоны существования каждой из фаз уменьшались. Для всех твердых растворов, кроме $x(Ba) = 0.3$, экспериментально полученные температуры фазовых переходов совпали с теоретически предсказанными. Для $x(Ba) = 0.3$ температуры фазовых переходов оказались выше, чем по данным фазовой диаграммы. Проведенная аппроксимация спектров набором Лоренцианов позволила проанализировать температурное поведение мягкой E(TO) моды. Установлено, что для твердого раствора с наименьшим содержанием бария, поведение E(TO) моды в тетрагональной фазе в большей степени напоминает классическое поведение мягкой моды в сегнетоэлектриках с фазовым переходом типа смещения. Анализ поведения центрального пика показал, что с увеличением концентрации стронция происходит ослабление взаимодействия центрального пика и мягкой E(TO) моды.

Зависимость структуры и спектральных свойств апконверсионных люминофоров $\beta\text{-NaYF}_4\text{:Yb,Er}$ от режима синтеза

Митюшкин Евгений Олегович

Леонтьев Андрей Владимирович, Жарков Дмитрий Константинович, Никифоров Виктор Геннадьевич

Казанский (Приволжский) федеральный университет

Шмелев Артемий Геннадьевич, к.ф.-м.н.

m1tyushck1n@yandex.ru

Интерес к наноразмерным технологиям растёт год от года, что объясняется многообещающими перспективами в различных сферах жизни современного общества. Одним из таких направлений является разработка наносенсоров для биологического использования [1]. Среди множества задач, таких как биовизуализация, адресная доставка лекарств, терапия, диагностика, избирательное воздействие на определённые белки и др., задача по измерению внутриклеточной температуры до сих пор остаётся нерешённой [2].

В данной работе мы рассматриваем возможности гидротермального метода синтеза для создания фторидных наночастиц $\beta\text{-NaYF}_4\text{:Yb,Er}$ заданной морфологии с целью изучения их фотофизических свойств и оценки перспективы использования в качестве флюоресцентных нанотермометров для измерения температуры внутри нейрона виноградной улитки. Как известно, кристаллы $\beta\text{-NaYF}_4\text{:Yb,Er}$ обладают ярко выраженными апконверсионными свойствами: при поглощении ближнего инфракрасного излучения возникает люминесценция в видимом оптическом диапазоне [3, 4]. Окно прозрачности биологических тканей позволяет инфракрасному свету проникать глубоко в ткани, при этом не вызывая перегрева, фотодеструкции и автофлюоресценции, которые обычно сопровождают поглощение тканями ультрафиолетового излучения [5, 6].

Гидротермальный метод с олеиновой кислотой в качестве стабилизирующего агента позволяет контролировать морфологию частиц от пластинок до стержней в диапазоне от 10 нм до 5 мкм. путем варьирования температуры, длительности синтеза, и соотношения реагентов. Олеиновая кислота здесь выступает в роли регулятора роста направления кристалла, адсорбируясь на различных гранях с разной эффективностью. Изменяя молярное отношение избытка ионов фтора F к общему количеству редкоземельных элементов Re от 5/1 до 8/1, скорость роста боковых граней уменьшается, а торцевых – увеличивается.

Нами были синтезированы частицы $\beta\text{-NaYF}_4\text{:Yb,Er}$ двух типов, которые друг от друга отличаются разными условиями гидротермального синтеза: F/Re = 5/1, T = 190 °C, t = 12 ч (1 тип); F/Re = 8/1, T = 190 °C, t = 24 ч (2 тип). Морфология поверхности синтезированных частиц исследовалась с помощью сканирующего электронного микроскопа EVO 50 XVP (Carl Zeiss) с системой зондового микроанализа «INCA Energy-350». Спектры апконверсионной люминесценции получены с использованием модульного спектрофлуориметра HORIBA FL-QM-8075-22-C с возбуждением диодным лазером на длине волны 980 нм и регистрацией с помощью ФЭУ R13456 с мультищелочным катодом.

Получившиеся частицы типа 1 лишь отдалённо напоминают шестиугольные пластины. Их размеры составляют до одного микрона. Частицы типа 2 имеют ярко выраженную стержневую форму с шириной в диапазоне 100-140 нм и длиной 1-1.6 мкм и обладают высокой монодисперсностью. Оба типа частиц показывают апконверсионную природу возбуждения люминесценции. Полосы люминесценции в областях 525, 550, 660 и 820 нм соответствуют излучательным переходам $^2\text{H}_{11/2} - ^4\text{I}_{15/2}$, $^4\text{S}_{3/2} - ^4\text{I}_{15/2}$, и $^4\text{I}_{9/2} - ^4\text{I}_{15/2}$ ионов эрбия Er^{3+} . Для частиц типа 1 относительная интенсивность полосы на 660 нм в два раза превышает таковую на 525 нм. Для частиц типа 2 относительные интенсивности этих линий сравнимы. Данный факт можно интерпретировать, как более эффективные многофононные переходы в частицах типа 1 по сравнению с частицами типа 2. Известно, что фторидные матрицы кристаллов $\beta\text{-NaYF}_4$ отличаются довольно низкой энергией фононов порядка 350 см^{-1} , что недостаточно для эффективных переходов по многофононному механизму. По всей видимости, в каскадных безызлучательных переходах участвуют иные высокоэнергетические осцилляторы. Такие осцилляторы могут быть образованы различного рода внутренними, поверхностными дефектами и органическими загрязнениями на поверхности. Уместно предположить, что наибольшим количеством дефектов обладает «рыхлая» невыраженная форма частиц 1. Мы полагаем, что это и является главным фактором, объясняющим относительно большие интенсивности линий на 660 и 810 нм частиц типа 1 по сравнению с частицами типа 2.

С точки зрения использования синтезированных частиц $\beta\text{-NaYF}_4\text{:Yb,Er}$ в качестве температурных наносенсоров предпочтение следует отдать частицам типа 2 в форме длинных стержней, которые, по всей видимости, обладают меньшим количеством дефектов и более низкой скоростью многофононной релаксацией по сравнению с частицами типа 1 с невыраженной плоской формой.

Список публикаций:

- [1] Sakaguchi R., Kiyonaka S., Mori Y.: *Curr. Opin. Biotechnol.* 2015, V. 31, P. 57-64.
[2] Rajagopal M. C., Valavala K. V., Gelda D., Ma J., Sinha S.: *Phys.* 2018, V. 272, P. 253-258.
[3] Alkahtani M. H., Gomes C. L., Hemmer P. R.: *Opt. Lett.* 2017, V. 42, P. 2451-2454.
[4] Wang Y. F., Liu G. Y., Sun L. D., Xiao J. W., Zhou J. C., Yan C. H.: *ACS Nano* 2013, V. 7, P. 7200-7206.
[5] Jia F., Li G., Yang B., Yu B., Shen Y., Cong H.: *Nanotechnol. Rev.* 2019, V. 8, P. 1-17.
[6] Dou Q. Q., Guo H. C., Ye E.: *Mater. Sci. Eng. C* 2014, V. 45, P. 635-643.

Магнитоэлектрические свойства мультиферроика на основе ниобата натрия калия и феррита висмута в диапазоне температур (300-573)К

Павленко Алексей Сергеевич

Мойса Максим Олегович

Южный федеральный университет

Мойса Максим Олегович

alexey.pavlenkoxx@gmail.com

Твёрдые растворы (ТР) мультиферроиков на основе ниобатов натрия-калия являются бессвинцовыми материалами, которые способны заменить опасные, свинецсодержащие керамики. Исследуемая трёхкомпонентная система $(\text{Na}_{0.5}\text{K}_{0.5})\text{NbO}_3\text{-BiFeO}_3$ может быть использована для создания и применения устройств на их основе в различных областях – от спинтроники до медицины [1, 2]. Целью работы является изучение магнитоэлектрических свойств ТР $0.20(\text{Na}_{0.5}\text{K}_{0.5})\text{NbO}_3\text{-}0.80\text{BiFeO}_3$ в интервале температур $T=(300\text{-}573)\text{K}$.

В качестве объектов исследования выступил ТР состава $0.20(\text{Na}_{0.5}\text{K}_{0.5})\text{NbO}_3\text{-}0.80\text{BiFeO}_3$. Образцы получены твердофазным синтезом в две стадии и спечены по обычной керамической технологии ($T_{\text{синт.1}}=1123\text{K}$, $\tau=4$ час., $T_{\text{синт.2}}=1123\text{K}$, $\tau=4$ час.; $T_{\text{спек.}}=1243\text{K}$, $\tau=2$ час).

Исследование поведения $\epsilon'/\epsilon_0(T)$ в диапазоне температур $T = (300\text{...}573)$ К и интервале частот электрического поля $f=(25\div 10^6)$ Гц при постоянном магнитном поле $0,85$ Тл проводилось на неполяризованных образцах с помощью измерительного стенда на базе LCR-метра Agilent 4980A.

Также были определены магнитоэлектрический и магнитоэлектрический коэффициенты [3]

$$MD(B) = \frac{\epsilon'(B) - \epsilon'(0)}{\epsilon'(0)}, ML(B) = \frac{\epsilon''(B) - \epsilon''(0)}{\epsilon''(0)} \quad (1)$$

Здесь $\epsilon = \epsilon' - i\epsilon''$ — комплексная диэлектрическая проницаемость материала, ϵ' и ϵ'' — ее действительная и мнимая части, $\epsilon(B)$ и $\epsilon(0)$ — диэлектрическая проницаемость в поле и без поля соответственно.

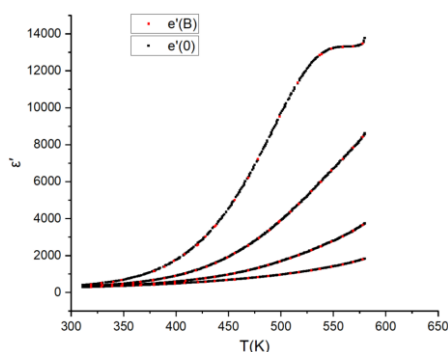


рис. 1 – зависимость диэлектрической проницаемости образца $\text{NaNbO}_3\text{-}0.75\text{KNbO}_3\text{-}\text{CdNb}_2\text{O}_6$ от температуры под действием магнитного поля и при его отсутствии

Для разных частот внешнего электрического поля получены зависимости диэлектрической проницаемости от температуры без магнитного поля и под влиянием магнитного поля (рис. 1). Установлено, что при $T=560\text{K}$ заметен пик для частоты 1 кГц. При этом внешнее магнитное поле с индукцией $0,8$ Тл вносит незначительный вклад в ϵ' на всём диапазоне частот внешнего электрического поля.

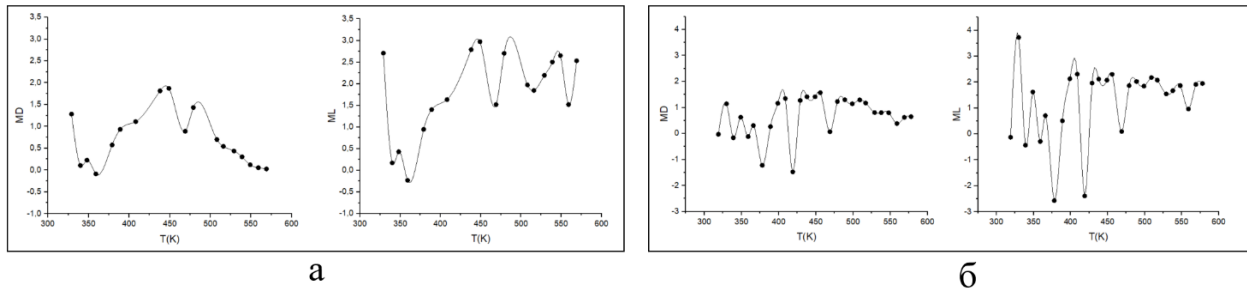


рис. 2 – Зависимости $MD(T)$ и $ML(T)$ для $TP NaNbO_3 - 0.75KNbO_3 - CdNb_2O_6$ в электрическом поле $f = 1$ кГц (а) и $f = 10$ кГц (б)

Из графиков на рисунке 2(а) можно сделать вывод, что магнитоэлектрический и магнитоэлектрический коэффициенты при частоте внешнего электрического поля 1 кГц принимают отрицательные значения при $T=350$ К. Так же установлено, что $MD(T)$ имеет тенденцию на снижение при температуре выше 480К, а $ML(T)$ на данном промежутке имеет резкие колебания в диапазоне от 1,3% до 2,8%. Пиковые значения для $MD(T)$ и $ML(T)$ достигаются при $T=450$ К и равны 1,87% и 2,97% соответственно.

Исследование магнитоэлектрического и магнитоэлектрического коэффициентов при частоте внешнего электрического поля 10 кГц (рис. 2, б) сопровождаются резкими скачками обеих величин в диапазоне от -3% до 4% при температуре 380–450К. При этом установлено, что $MD(T)$ и $ML(T)$ принимают минимальные значения при температурах $T = 380$ К и 420К и равны -1,22%, -1,47% и -2,57%, -2,39% соответственно. В интервале 450–580К магнитоэлектрический и магнитоэлектрический коэффициенты изменяются в диапазоне 1,57–0,65% и 2,30–1,54% соответственно, за исключением точек $T=470$ К и $T=560$ К, где происходит резкий спад обеих величин/

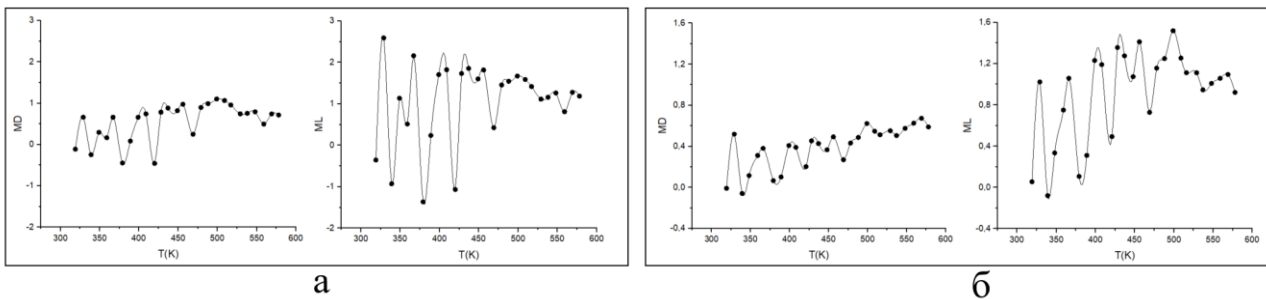


рис. 3 – Зависимости $MD(T)$ и $ML(T)$ для $TP NaNbO_3 - 0.75KNbO_3 - CdNb_2O_6$ в электрическом поле $f = 100$ кГц (а) и $f = 1$ МГц (б)

При частоте внешнего электрического поля 100 кГц магнитоэлектрический и магнитоэлектрический коэффициенты изменяются сильными колебаниями в температурном диапазоне 320-480К (рис. 3, а). Участок 480-580К характеризуется тенденцией на снижение для исследуемых величин с минимумом в точке $T=560$ К.

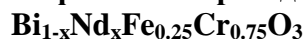
Также из графиков на рисунке 3 (б) можно сделать вывод о том, что магнитоэлектрический коэффициент слабо выражается под действием внешнего электрического поля с частотой 1 МГц. При этом, можно заметить, что $MD(T)$ возрастает на всём исследованном температурном интервале, достигая максимального значения 0,67% при температуре 570К. Вместе с этим обнаружено, что магнитоэлектрический коэффициент в электрическом поле с частотой 1 МГц обладает сильными колебаниями в промежутке 320-500К и в конечной точке достигает максимума 1,51%, но при $T>500$ К характеризуется снижением до 0,92%.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности 2023 г.). Проект № FENW-2023-0010/(Г30110/23-11-ИФ).

Список публикаций:

- [1] Gene H. Haertling *PLZT electrooptic materials and applications – a review // Ferroelectrics*. - 1987. - №75. - С. 25-55.
- [2] Charles Augustine, Xuanyao Fong, Kaushik Roy *Dual Ferroelectric Capacitor Architecture and its Application to TAG RAM // IEEE International Conference on Integrated Circuit Design and Technology*. - 2010. - С. 24-38.
- [3] А.В. Павленко, А.В. Турик, Л.А. Резниченко, Л.А. Шилкина, Г.М. Константинов *Магнитоэлектрический эффект в керамике $Bi1/2La1/2MnO3$ // Письма в ЖТФ*. - 2013. - том 39, вып. 1. - С. 47-53.

Температуры магнитных фазовых переходов в твердых растворах



Пикуль Анастасия Денисовна

Дорофеева Вера Вячеславовна

Южный федеральный университет

Кубрин Станислав Петрович, к.ф.-м.н.

nasta.pikul.34@gmail.com

Были проведены исследования раствора на основе феррита висмута BiFeO_3 , который является потенциальным бесвинцовым сегнето-пьезоэлектрическим материалом. Относящийся к структурному типу перовскита, он характеризуется ромбоэдрической $R3c$ пространственной группой симметрии при комнатной температуре.

Методами мессбауэровской спектроскопии проведено определение температур магнитных фазовых переходов (T_N) и локальных состояний атомов железа в керамических образцах твердых растворов $\text{Bi}_{1-x}\text{Nd}_x\text{Fe}_{0.25}\text{Cr}_{0.75}\text{O}_3$ ($x=0.05, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1$).

Методом температурного сканирования были получены температурные зависимости амплитуды линий мессбауэровских спектров $\text{Im}(T)$ для всех образцов системы $\text{Bi}_{1-x}\text{Nd}_x\text{Fe}_{0.25}\text{Cr}_{0.75}\text{O}_3$ (Рис. 1). Спад на данных кривых соответствует температуре магнитного фазового перехода T_N . Следует отметить, что при $x>0.2$ спад зависимости становится более резким. По кривым $\text{Im}(T)$ была проведена оценка значений T_N . Значений T_N обобщены в виде концентрационной зависимости и представлены на рис. 2.

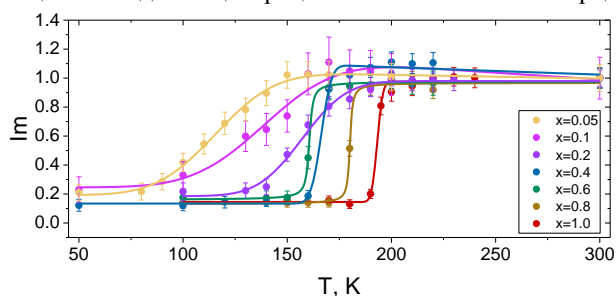


рис. 1. Зависимости амплитуды парамагнитных линий мессбауэровских спектров твердых растворов $\text{Bi}_{1-x}\text{Nd}_x\text{Fe}_{0.25}\text{Cr}_{0.75}\text{O}_3$ приведенные к их значениям при 300К.

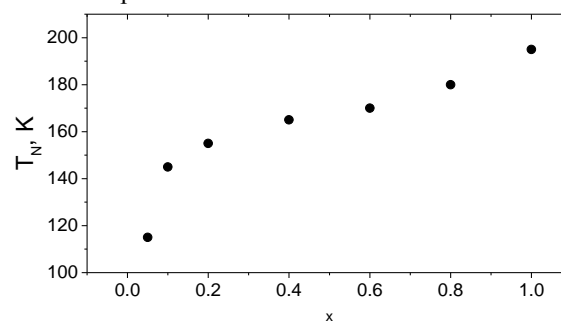


рис.2. Концентрационная зависимость T_N твердых растворов $\text{Bi}_{1-x}\text{Nd}_x\text{Fe}_{0.25}\text{Cr}_{0.75}\text{O}_3$.

Значение T_N для образца с $x=0.05$ примерно совпадает со значением наблюдаемым для BiCrO_3 [1]. В концентрационном диапазоне от $x=0.05$ до $x=0.4$ наблюдается резкое увеличение T_N . При $x>0.4$ значения T_N примерно линейно возрастают до $\approx 195\text{K}$ для $x=1.0$. При этом значение T_N для $x=1.0$ меньше значения полученного для NdCrO_3 (219K) [2]. Концентрационный диапазон $0.05 \leq x < 0.4$, в котором происходит резкое возрастание T_N совпадает с границами морфотропной области системы. Вероятно, при переходе из $R3c$ в $Rmna$ происходит изменение длин и углов связей в цепочках косвенного магнитного обменного взаимодействия, что приводит к увеличению обменной энергии и повышению значения T_N . Рост T_N при $x>0.4$ вероятно обусловлен уменьшением параметра ячейки при замещениях ионов Bi^{3+} ионами Nd^{3+} .

Список публикаций:

- [1].Belik A. A. *Magnetic properties of solid solutions between BiCrO_3 and BiGaO_3 with perovskite structures*// *Science and Technology of Advanced Materials* 2015, 16, 026003
[2].Bartolomé F., Bartolomé J., Castro M., Melero J.J. *Specific heat and magnetic interactions in NdCrO_3* //*Phys. Rev. B* 2000, 62, 1058

Использование методов компьютерного зрения в металлографии алюминиевых сплавов

Подкин Егор Сергеевич

Котенков Павел Валерьевич, Катков Николай Николаевич, Пикалова Надежда Сергеевна, Рыльцев Роман Евгеньевич.

Институт металлургии УрО РАН

Котенков Павел Валерьевич к.х.н.

cherdancev_egor@mail.ru

Рассмотрена возможность применения алгоритмов компьютерного зрения, основанных на использовании сверточных нейронных сетей, для анализа изображений микроструктуры литых алюминиевых сплавов.

Одним из наиболее ярких и выдающихся достижений современных систем искусственного интеллекта, является развитие и внедрение систем компьютерного зрения (CV – computer vision) – программ и машин, способных производить обнаружение, отслеживание и классификацию объектов. CV-системы все более глубоко внедряются в различные сферы нашей жизни, в том числе и в науку. Одним из перспективных приложений CV в науках о материалах является разработка алгоритмов, позволяющих автоматически анализировать изображения, полученные в ходе металлографического анализа образцов методами оптической и электронной микроскопии. Действительно, на сегодняшний момент стандартный анализ металлографических шлифов требует вмешательства исследователя и больших временных затрат, связанных с распознаванием, классификацией и оконтуриванием различных объектов: границ зерен, межфазных границ, включений и т.п. Автоматизация данного процесса позволила бы на порядки сократить временные затраты и увеличить точность анализа. В данной работе рассматривается одна из частных задач в рамках обозначенной проблемы. Мы разрабатываем CV-систему для автоматизации анализа микроструктуры алюминиевых сплавов (Al, Al-Cu, Al-Zn). На первом этапе была поставлена задача – автоматизировать распознавание границ зерен и выделение их области.

Для решения задачи сегментации изображений использовалась нейронная сеть с архитектурой Mask R-CNN (regional CNN), являющаяся расширением Faster R-CNN – платформы для обнаружения объектов [1]. Использовалась модель на основе COCO-dataset (крупномасштабного набора данных для обнаружения, сегментации и подписи объектов), предобученная на множестве естественных изображений. Использование такой предварительно обученной сети позволяет быстро оптимизировать ее для решения конкретной задачи с использованием сравнительно малых наборов данных.

Исходный датасет условно можно разбить на 8 групп в зависимости от качества фотографий и количества зерен. В среднем в каждой группе оказалось от 6 до 10 фотографий. От каждой группы, в зависимости от ее размера, было отобрано по 1-2 фотографии для проверочного датасета. В итоге тренировочный составил 52 изображения, а проверочный – 14. При обучении с минимальным доверительным порогом 0,75 точность оконтуривания зерен оказалась в среднем на уровне 0,93.

В результате проделанной работы функционал нейросети был дообучен для обнаружения границ и области зерна на снимках микроструктуры алюминиевых сплавов. Уже на данном этапе такой подход может заменить метод сравнения с контрольной шкалой, метод подсчета зерен, метод подсчета пересечений зерен, планиметрический метод, повышая скорость обработки изображений микроструктуры сплавов в сотни раз. Результат работы нейросети на примере одной из микрофотографий тестового датасета представлен на *рис. 1*.



рис.1. Результат работы обученной нейросети.

Список публикаций:

- [1] K. He, G. Gkioxari, P. Dollár, R. Girshick, *Comput. Vis. Patt. Recognit.* 1703.06870 (2017).
- [2] A. Dutta, A. Zisserman, *ACM Int. Conf. Mult.* 2276–2279 (2019).

Механические свойства многослойного графена при сжатии и растяжении: атомистическое моделирование

Полякова Полина Викторовна

Уфимский государственный нефтяной технический университет

Баимова Юлия Айдаровна, д.ф.-м.н.

polina.polyakowa@yandex.ru

Графен считается одним из наиболее перспективных материалов, поскольку обладает уникальными механическими и физическими свойствами. Известно, что графеновые волокна обладают хорошей эластичностью и регулируемым коэффициентом Пуассона [1], высокой прочностью [2,3], а благодаря своей пористой природе могут быть отличными кандидатами для хранения и адсорбции других элементов, например водорода или металлических наночастиц. Несмотря на обширность исследований в данной области, вопросы, связанные с механическим поведением графена при различных обработках, остаются открытыми. В связи с этим целью данной работы является исследование механических свойств многослойного графена в процессе двухосного сжатия вдоль осей x , y , и одноосного растяжения вдоль трех направлений.

Начальная структура представляет собой шесть листов графена, каждый из которых состоит из 3936 атомов углерода, с межслоевым расстоянием в два раза большим ($h = 7.85 \text{ \AA}$), чем у графита ($h_{\text{графит}} = 3.34 \text{ \AA}$). Рассматриваемое начальное межслоевое расстояние является нетипичным для графеновых структур и выбрано с целью создания новой объемной углеродной структуры с улучшенными свойствами. Размеры начальной структуры: $L_x = L_y \approx 100 \text{ \AA}$, $L_z \approx 47 \text{ \AA}$. Периодические граничные условия применяются во всех направлениях. Постоянство температуры (300 К) в системе обеспечивает термостат Носе-Хувера. Для получения структуры скомканного графена проводится двухосное сжатие вдоль осей x и y при 300 К. Для исследования механических свойств проводится одноосное растяжение вдоль осей x , y и z с постоянной скоростью деформации 0.005 ps^{-1} . Все расчеты проводятся с использованием бесплатного программного пакета LAMMPS и межатомного потенциала AIREBO [4].

Показано, что в процессе двухосного сжатия в начале деформации наблюдается появление волн на поверхности графеновых листов, с увеличением деформации сжатия эти волны трансформируются в острые складки из-за Ван-дер-Ваальсового взаимодействия между листами. Для сравнения такая же деформационная обработка проводится для одиночного листа графена, показано, что острые складки не образуются без присутствия других слоев графена.

Установлено, что поведение графеновых волокон зависит от направления растяжения и морфологии структуры, полученной в ходе сжатия. Так при растяжении вдоль оси x наблюдается переход от складок с острыми краями к структуре с гладкими складками. Каждый лист графена до степени деформации $\varepsilon = 0.62$ перестраивается так, что на поверхности остается одна складка. Кристаллический порядок в структуре сохраняется до $\varepsilon = 0.73$, дальнейшее растяжение приводит к образованию аморфной углеродной структуры. Критические деформация и напряжение составляют 1.0 и 172 ГПа соответственно.

При растяжении вдоль оси y по сравнению с растяжением по оси x , складки с острыми ребрами не разглаживаются до конца, но сгибы листов графена становятся мягче. Также наблюдается появление новых поперечных волн на складках, полученных в результате сжатия. Разрыв структуры происходит при критических значениях деформации и напряжения 1.18 и 144 ГПа соответственно.

При растяжении вдоль направления z , структура демонстрирует наибольшую пластичность. Укладка листов графена вдоль оси z , позволяет им легко скользить друг по другу и складываться в более плотную укладку в направлении растяжения. Образование поры наблюдается при деформации 1.96 и напряжении 108 ГПа

Показано, что сжатый многослойный графен не является изотропным. Структурные особенности, сформировавшиеся в результате сжатия многослойного графена, кардинальным образом влияют на его прочность и пластичность при растяжении. Таким образом, управляя укладкой слоев в многослойном графене, можно управлять его физическими и механическими свойствами.

Список публикаций:

- [1] Xu X., Zhang Q., Yu Y., Chen W., Hu H., Li H. // *Advanced Materials*. 2016. V. 28. P. 9223–9230
- [2] Baïmova J.A., Liu B., Dmitriev S.V., Zhou K. // *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2015. V. 48. P. 095302.
- [3] Baïmov, J.A., Polyakova P V., Shcherbinin S.A. // *Fibers*. 2021. V. 9. P. 85.
- [4] Stuart S.J., Tutein A.B, Harrison J.A. // *Journal of Chemical Physics*. 2000. V. 112. P. 6472–6486.

Исследование механизмов образования соединений Dy и Bi при синтезе многослойных наноструктур DyCo/Bi/Pu

Спечев Юрий Владимирович

Яковчук Виктор Юрьевич, Патрин Геннадий Семенович

Сибирский федеральный университет

Институт физики имени Л.В. Киренского СО РАН

Косырев Николай Николаевич, к.ф.-м.н.

yuryspechev@yandex.ru

Во многих сферах электроники материалы с заданными магнитными свойствами на основе слоистых наноструктур с использованием d и f металлов представляют собой большой интерес. Такие материалы могут быть использованы при создании носителей информации с высокой плотностью записи, новых типов магниторезистивной памяти и высокочувствительных датчиков магнитного поля [1]. В настоящее время межслоевые взаимодействия в многослойных системах с немагнитной полуметаллической прослойкой являются мало изученными. Работа с такими системами актуальна в рамках исследования спин-вентильных структур и эффекта гигантского магнитосопротивления [2]. Одним из примеров такой структуры может служить система $Dy_xCo_{1-x}/Bi/Pu$, в которой висмут использован в качестве немагнитной прослойки, поскольку обладает рядом необычных физических свойств. Однако при синтезе таких систем на границе раздела зачастую образуются соединения, которые оказывают существенное влияние на интегральные магнитные свойства всей наноструктуры. Ранее, нами было обнаружено нетривиальное температурное поведение намагниченности в таких системах [3], которое мы связали с возможным образованием пниктогенидов- соединений диспрозия и висмута в интерфейсе DyCo-Bi. В настоящей работе, мы более детально рассмотрим эту проблему.

Синтез структур $Dy_xCo_{1-x}/Bi/Pu$ проводился методом термического испарения в вакууме (базовый вакуум составил $2 \cdot 10^{-6}$ mbar) и включал в себя последовательное нанесение слоев Pu ($Ni_{1-x}Fe_x$ 18 < x < 23 ат. %) висмута и сплава Dy_xCo_{1-x} (17 < x < 26 ат. %). Для исследования структуры интерфейса $Dy_xCo_{1-x} - Bi$ были проведены измерения спектров эллипсометрических параметров Ψ и Δ на эллипсометре «Спектроскан» в спектральном диапазоне $E=2-5$ эВ.

Для точного определения вида соединения были проведены эллипсометрические измерения и решена обратная задача. Для аппроксимации эллипсометрических данных использовалась многослойная модель [4], в которой коэффициенты Френеля каждого последующего слоя связаны с коэффициентами предыдущего следующим рекуррентным соотношением:

$$R_{j+1} = \frac{r_{j+1}(1 - r_j r_{j+1}) + (r_j - r_{j+1})X}{1 - r_j r_{j+1} + r_{j+1}(r_j - r_{j+1})X} \quad (1)$$

где $X = \exp(-2i\delta)$, δ - фазовая толщина соответствующего слоя, r_i - коэффициенты Френеля соответствующих границ раздела для p- и s- поляризаций света

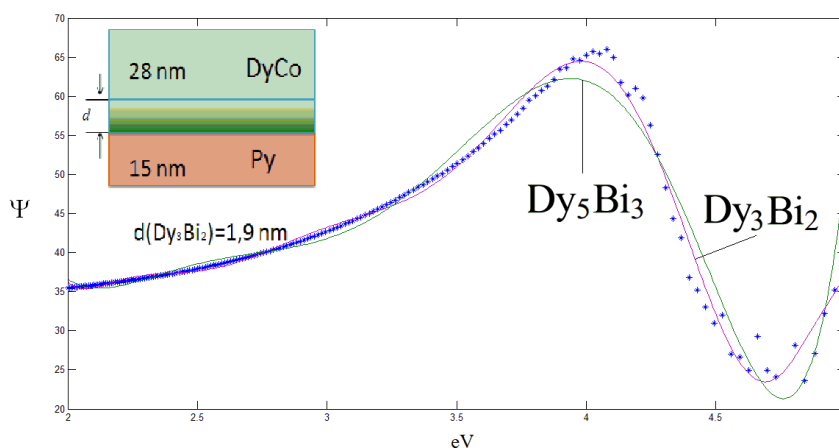


рис.1. Спектр эллипсометрического параметра Ψ для трехслойной пленки $Dy_xCo_{1-x}/Bi/Pu$. На вкладке показаны параметры слоев, используемые при решении обратной задачи эллипсометрии

Однако, если учитывать в модели, что между слоями – резкая граница раздела, такая модель не описывает эллипсометрический спектр. Данный факт подтверждает предположение [3] о возникновении интерметаллического слоя между Du_xCo_{1-x}/Bi . Для учета такого слоя в модели был использован метод эквивалентной пленки [4], заключающийся во введении в многослойную модель дополнительного слоя, который аппроксимирует интерметаллид смесью двух материалов. На рисунке 1 показан эллипсометрический спектр параметра Ψ , а также модельные кривые для соединений Du_3Bi_3 и Du_3Di_2 . Можно отметить, что модель для слоя, представляющего собой смесь висмута с диспрозием в соотношении 2:3 лучше аппроксимирует экспериментальные данные.

Таким образом, в данной работе на основании анализа эллипсометрических спектров, получено подтверждение образования интерметаллического слоя между Du_xCo_{1-x}/Bi , а так же рассмотрена его предполагаемая структура и механизм образования. Изучение магнитных свойств и структуры подобных межслоевых соединений позволит не только глубже понять механизм и природу образования данных структур, но позволит предсказывать и создавать материалы с заданными магнитными свойствами.

Список публикаций:

- [1] Огнев, А. В. *Анизотропия и микромагнитная структура низкоразмерных ферромагнетиков: дис. ... д-ра физ.-мат. наук: 01.04.11 / Огнев Алексей Вячеславович. – Владивосток, 2016. – С. 276.*
 [2] Binns C. *Magnetism at surfaces and interfaces // Handbook of Surfaces and Interfaces of Materials. – 2001. – С. 357-392.*
 [3] Kosyrev N.N., Yakovchuk V.Yu., Patrin G.S., Komarov V.A., Volchenko E.N., Tarasov I.A. *Optical and magnetic properties of the $Du_xCo_{1-x}/Bi/Py$ trilayers Technical Physics Letters Vol. 47, Is. 2, P. 107*
 [4] Aspnes D.E., J.B. Theeten, F. Hottier // *Phys. Rev. B. – 1979. – V. 20. – № 8. – P. 3292-3304*

Формирование ультрамелкозернистой и нанокристаллической структуры в жаропрочных никелевых сплавах

Степухов Егор Михайлович

Степухов Егор Михайлович, Галиева Эльвина Венеровна, Классман Екатерина Юрьевна

Уфимский университет науки и технологий

Галиева Эльвина Венеровна, к.т.н.

egorstepukhov@mail.ru

Ультрамелкозернистая (УМЗ) и нанокристаллическая (НК) структура позволяет использовать никелевые материалы как промежуточную прокладку между свариваемыми под давлением в температурно-скоростных условиях сверхпластичности заготовками из, например, одноименных сплавов и получать качественные неразъемные соединения. Из-за низких технологических свойств этих сплавов с исходной крупнозернистой (КЗ) структурой для формирования НК структуры стали использовать такой метод интенсивной пластической деформации (ИПД), как кручение диска под давлением. Целью работы являлось исследование влияния различных методов ИПД на формирование в ЖНС ультрамелкозернистой и нанокристаллической структуры.

В качестве материалов исследования были выбраны деформируемые жаропрочные никелевые сплавы: ЭК79 и ЭП975.

По результатам исследования показано, что в процессе деформационно-термической обработки (ДТО) с поэтапным снижением температуры обработки в двухфазной $\gamma+\gamma'$ -области исходная КЗ структура в никелевых сплавах ЭП975 и ЭК79 трансформируется в УМЗ структуру дуплексного типа с размером зерен матрицы (γ -фазы) для ЭП975 ~0,6 мкм (рис. 1а), для ЭК79 ~0,3 мкм (рис. 1б).

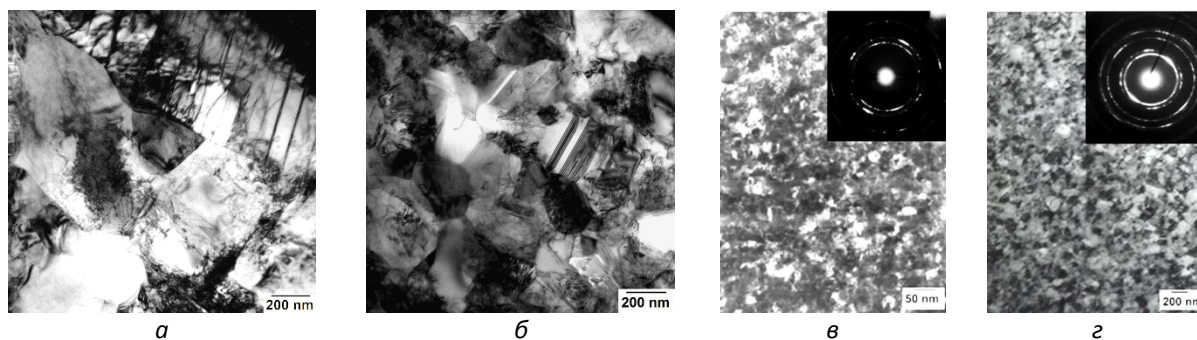


рис. 1. Микроструктура сплавов после: ДТО а – ЭП975, б – ЭК79 и после ИПДк в - ЭП975, г - ЭК79

ИПД кручением на наковальне Бриджмена при 5 оборотах приводит к формированию во всём объёме деформируемого материала НК структуры со средним размером зерен матричной γ -фазы: для сплава ЭП975 – 30...50 нм (рис. 1в) и 50...60 нм для сплава ЭК79 (рис. 1 г).

По результатам измерений установлено, что с измельчением размера зерна до УМЗ состояния микротвёрдость возрастает на ~17% для ЭП975 и на ~26% для ЭК79, а с увеличением числа оборотов до 5 наблюдается рост микротвёрдости: на ~37% для ЭП975 и ~28% для ЭК79.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 22-79-00271. Микроструктурные исследования осуществляли на оборудовании Центра Коллективного Пользования ИПСМ РАН.

Тепловые свойства пористых кремниевых наноматериалов

Теплинская Анастасия Сергеевна

Федоров Александр Семенович

Сибирский федеральный университет

Федоров Александр Семенович

Anastasiateplinskaia@gmail.com

Нанопористый кремний представляет собой твердый материал с пористой структурой, состоящей из пор размером менее 100 нм. Благодаря уникальной гибкости физико-химических свойств (пористость, размер пор, пассивация внутренней поверхности различными веществами и др.) пористый кремний находит применение в различных областях. Например, пористый кремний уже используют в химических и биохимических сенсорах, в системе подачи лекарственного средства в определенный участок тела, в оптоэлектронике, в биодетекции микроРНК, при создании топливных элементов, в литий-ионных аккумуляторах, в термодатчиках и др.

Основной вопрос данного исследования заключается в том, чтобы определить зависимость между структурой нанопористого кремния и его тепловыми свойствами. В недавнем экспериментальном исследовании [1] уже изучали 3ω методом тепловые свойства нанопористых материалов на основе кремния, где было показано нелинейное возрастание теплоемкости, нелинейное уменьшение теплопроводности в зависимости от степени пористости материала и наличия пассивированной внутренней поверхности. В нашем исследовании были созданы модели наноструктурного кремния, показанные на (рис.2), и использован расчётный метод молекулярной динамики (МД) для этих моделей. МД отслеживает временную эволюцию системы путем интегрирования уравнений движения атомов. Расчёты были выполнены с помощью крупномасштабного атомно-молекулярного массивно-параллельного симулятора (LAMMPS). Были получены данные для теплоемкости, теплопроводности и плотности фононных состояний моделей нанокремния с учетом пассивации внутренней поверхности ионами -H, -OH, -O [2].

Установлено, что теплоемкость кремниевых пористых наноматериалов монотонно возрастает до 30% с увеличением площади пористой внутренней поверхности и при ее пассивации ионами, что показано на (рис.1). Это явление объясняется смещением фононной плотности состояний исследуемых материалов в низкочастотную область спектра. Смещение обусловлено большой внутренней поверхностью наноматериала и, как следствие, сохранением тепловой энергии локальных колебательных мод пассивирующих ионов благодаря большой амплитуды колебания за счет «размягчения» их химической связи. Последнее было подтверждено путем расчёта плотности фононных состояний моделей нанопористого кремния с различной площадью внутренней поверхности и пассивации различными ионами.

Также показано, что теплопроводность кремниевых наноматериалов зависит от степени их пористости и может существенно изменяться при пассивации их внутренней поверхности различными ионами, что показано на (рис.1). Показано, что в различных моделируемых типах пористого кремния теплопроводность изменяется на 1–2 порядка по сравнению со значением для объемного кремния. В то же время установлено, что характер пассивации внутренних поверхностей нанокремния влияет на теплопроводность. Например, пассивация поверхностей водородом существенно не изменяет этот параметр, тогда как пассивация ионами кислорода снижает его в среднем в два раза, а пассивация гидроксид ионами увеличивает теплопроводность в 2–3 раза.

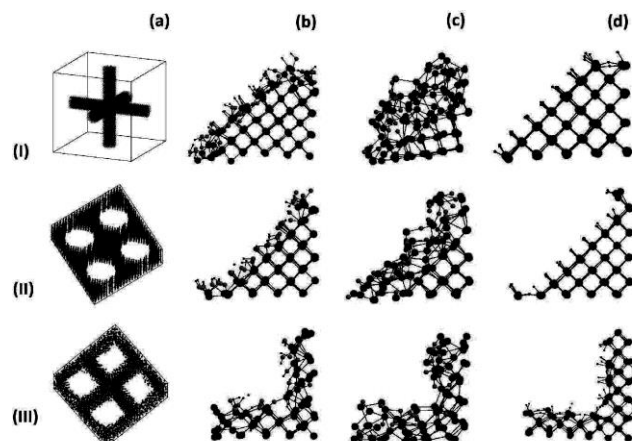


рис. 2. Модели пористого кремния. Ряд I — аэрокристал, ряд II — круглая пора, ряд III — квадратная пора. Столбцы соответствуют (a) исходной структуре, (b) -OH-пассивации, (c) -O-пассивации и (d) -H-пассивации.

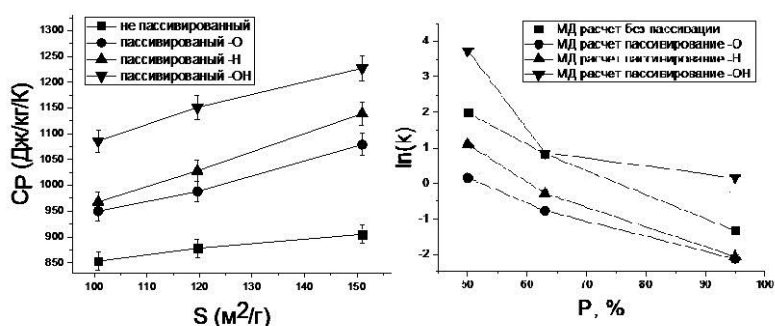


рис.1. Слева данные МД расчета теплоемкости для моделей в зависимости от площади внутренней поверхности S . Справа представлен натуральный логарифм теплопроводности для моделей с разной пористостью P . Квадраты — результат моделирования МД для случая без покрытия; круги показывают моделирование МД с покрытием -O; треугольники, направленные вверх, показывают моделирование МД покрытием -H; и треугольники, направленные вниз, показывают моделирование МД с покрытием -OH.

Данные МД расчета согласуются с имеющимися экспериментальными значениями. Результаты этого исследования могут быть использованы для разработки наноматериалов с улучшенными тепловыми характеристиками для различных приложений, в том числе для термодатчиков и накопления тепловой энергии.

Работа была поддержана грантом Российского научного фонда «Проведение фундаментальных научных исследований и поисковых научных исследований отдельными научными группами» (региональный конкурс)», N23-12-20007

Список публикаций:

- [1] Erfantalab S., Parish G., Keating A. Determination of thermal conductivity, thermal diffusivity and specific heat capacity of porous silicon thin films using the 3ω method //International Journal of Heat and Mass Transfer. – 2022. – Т. 184. – С. 122346.
 [2] Fedorov A. S., Teplinskaja A. S. Thermal properties of porous silicon nanomaterials //Materials. – 2022. – Т. 15. – №. 23. – С. 8678.

Исследование структуры и механических свойств жаростойких покрытий из металломатричных композиционных материалов на основе систем Co – SiC – ZrN

Широбокова Анна Сергеевна
 Харанжевский Евгений Викторович

Удмуртский государственный университет
 Харанжевский Евгений Викторович, д.т.н.
anna362100@gmail.com

В настоящее время назрела проблема создания жаростойких материалов для эксплуатации при температурах свыше 1000°C. Так, например, во время работы внутри турбины современных авиадвигателей температура достигает 1150°C. Торец лопаток, входящих в конструкцию двигателя, подвергается разрушению

из-за сильного перегрева и контакта внешней оболочкой турбины. И для того, чтобы защитить ее от разрушения, необходимо создание твердого жаростойкого керамического покрытия, которое будет наноситься на торец. Разработано множество различных методов нанесения керамических покрытий: магнетронное среднечастотное распыление мишеней на основе сплавов циркония с редкоземельными металлами с последующим плазмохимическим осаждением керамики в среде аргонокислородной плазмы [1], шликерно-обжиговая технология получения жаростойких эмалевых покрытий [2], нанесение основного металлического жаростойкого подслоя и верхнего керамического теплозащитного слоя с последующей лазерной обработкой [3] и другие. Таким образом, существует немало методов нанесения жаростойких керамических покрытий. Наибольший интерес в настоящее время представляют процессы лазерной обработки покрытий, так как они позволяют обеспечить равномерное проплавление поверхностного слоя на заданную глубину и наилучшим образом подходят по технологическим параметрам: не требуют применения вакуумных камер и обладают высокой производительностью.

В рамках данной работы была поставлена следующая цель: создание жаростойких покрытий из металломатричных композиционных материалов на основе систем Co – SiC – ZrN. Для достижения этой цели были поставлены следующие задачи: исследование структурно-фазового состава керамических покрытий на поверхности стали; исследование влияния химического состава на жаростойкость; исследование влияния добавки Cr₂AlC на жаростойкость.

В статье [4] было показано, что катастрофическое разрушение атомарно-слоистых керамических материалов, таких как Cr₂AlC, можно эффективно преодолеть, не только подавляя рост трещин вдоль слабо связанных плоскостей, но и залечивая их по мере их образования. Например, вдавливанием нестесненных образцов показали, что даже небольшого пуассоновского расширения кристалла по нормали к слабосвязанным базисным плоскостям достаточно, чтобы вызвать зарождение и быстрый рост трещин вдоль этих плоскостей. Тем не менее, вдавливание этих материалов в условиях небольшого деформационного ограничения по нормали к слабосвязанным базальным плоскостям приводит к короблению и перегибу связей между несколькими параллельными трещинами и образованию перегибов. Как только образуется изломная полоса, поверхности части трещины, лежащей внутри изломной полосы, подвергаются постоянному наклону, скручиванию и закрытию, что приводит к физическому заживлению. Поэтому в качестве добавки использовался Cr₂AlC, который в теории должен снижать количество трещин в получаемом керамическом покрытии.

Смесь порошков Co – ZrN – SiC в соотношении 25% (весовых) : 45% : 30% соответственно наносили на поверхность. Выбор компонентов обусловлен тем, что цирконий и кремний образуют на поверхности пленку оксидов, обеспечивающие жаростойкость покрытий, а кобальт в данном случае выступает в качестве матрицы. Улучшающая свойства добавка Cr₂AlC вводилась в количестве 0%, 1%, 4%, 10%, 20% от общей массы смеси. Перед нанесением на подложку из стали смесь порошков смешивали со спиртовым раствором канифоли до образования однородной суспензии при объемном соотношении компонентов 1:1. Далее полученная суспензия наносилась на поверхность образца. Для лазерного сплавления использовали импульсный иттербиевый оптоволоконный лазер номинальной мощностью 50 Вт с длиной волны 1,065 мкм и рабочую камеру, которую продували аргоном.

Рентгеноструктурные исследования образцов были выполнены с использованием дифрактометра ДРОН-6М при комнатной температуре. Использовали Co-Kα излучение. Сканирование углов 2θ осуществлялось с шагом 0,02 град. Время выдержки в каждой точке составляло 5 с. Растровое изображение поверхности получали на сканирующем электронном микроскопе FEI INSPECT S50 при ускоряющем напряжении 20 кВ. Для определения жаростойкости использовался гравиметрический метод с выдержкой в печи при 900°C в течение 30 мин в атмосфере воздуха.

Согласно рис. 1 наименьшее количество железа (1,71 атомных %), вышедшего на поверхность покрытий после выдержки в печи в ходе исследования спектров методом EDX, имеет образец, в состав которого входит 10% добавки. Таким образом, его защитные свойства лучше, чем у остальных образцов, так как сплошность этого покрытия намного выше. Гравиметрические исследования показали, что наименьший прирост массы имеет образец с 10% добавки – 0,0245 г. Это говорит о том, что на поверхности покрытия образуется минимальное количество окислы и что его жаростойкие свойства существенно выше, чем у остальных образцов. Рентгеноструктурный анализ показал наличие следующих фаз во всех образцах: ZrN, ZrC, CoSi, SiC. Карбид циркония обладает высокой коррозионной стойкостью, устойчивостью к сильным кислотам и щелочам. Нитрид циркония при сплавлении с алюминием повышает твердость из-за перестройки структуры. Силицид кобальта медленно окисляется кислородом и водяным паром при 1200°C, устойчив к действию азотной кислоты и концентрированной серной, однако растворим под действием соляной. Карбид кремния имеет очень высокую жаропрочность, водяным паром окисляется лишь при 1300°C, однако хорошо взаимодействует с кислотами и щелочами. Таким образом, обнаруженные фазы имеют хорошие свойства по защите от действия агрессивной среды.

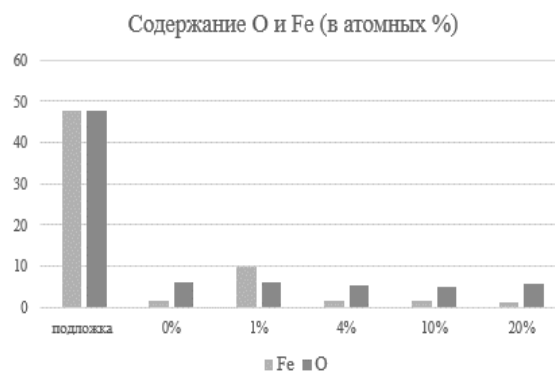


рис.1. Диаграмма содержания железа в образцах после выдержки

Результатом работы являются данные энергодисперсионного, рентгеноструктурного и гравиметрического анализа, на основе которых можно сделать следующие выводы:

1. Добавление Cr_2AlC в состав покрытий на основе $\text{Co} - \text{ZrN} - \text{SiC}$ увеличивает термостойкость покрытий, но увеличивает протяженность трещин покрытий, сформированных в процессе лазерного сплавления. Оптимальное содержание Cr_2AlC составляет 10%.

2. Механизм улучшения защитных свойств покрытий при добавлении Cr_2AlC связан с улучшением трещиностойкости покрытий при их медленном нагреве в печи в ходе испытаний на жаростойкость.

3. Добавление Cr_2AlC в состав приводит к уменьшению шероховатости покрытий.

4. Защитные свойства покрытий при высоких температурах связаны с формированием на поверхности пленки из оксидов циркония и кремния.

Список публикаций:

[1] Выбор керамического материала для теплозащитных покрытий лопаток авиационных турбин на рабочие температуры до 1400°C [Электронный ресурс]. – URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/vybor-keramicheskogo-materiala-dlya-teplozaschitnyh-pokrytiy-lopatok-aviatsionnyh-turbin-na-rabochie-temperatury-do-1400-s> (дата обращения 02.06.2022).

[2] Жаростойкое стеклокерамическое покрытие для защиты деталей камер сгорания газотурбинных двигателей [Электронный ресурс]. – URL: https://journal.viam.ru/ru/system/files/uploads/pdf/2016/2016_4_3_0.pdf (дата обращения 02.06.2022).

[3] Современные материалы, применяемые в машиностроении [Электронный ресурс]. – URL: https://elibrary.ru/download/elibrary_38278372_50309884.pdf (дата обращения 02.06.2022).

[4] Room temperature crack-healing in an atomically layered ternary carbide [Электронный ресурс]. – URL: <https://www.science.org/doi/10.1126/sciadv.abg2549> (дата обращения 03.06.2022).

17 - Радиофизика. Электроника

Бармин Никита Михайлович, магистрант 1 года обучения
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
Сравнение методов модуляции сигналов в спутниковых системах связи
Иванова Ирина Николаевна, к.ф.-м.н.
e-mail: niki.barmin@yandex.ru стр. 253

Гризодуб Алексей Николаевич, магистрант 1 года обучения
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
Полосно-пропускающий SIW-фильтр
Крутиев Сергей Владимирович, к.ф.-м.н.
e-mail: agrizodub@sfedu.ru стр. 255

Коноплев Артем Александрович, магистрант 1 года обучения
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
Моделирование диаграммообразующих устройств на основе метаповерхностей в ГГц диапазоне
Клещенко Анатолий Борисович, к.ф.-м.н.
e-mail: akonoplev@sfedu.ru стр. 256

Кудряшкин Назар Андреевич, 4 курс
Самара, Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева,
физический
Расчёт уширения спектральной линии излучения в дискретных моделях автоколебаний
Зайцев Валерий Васильевич, к.ф.-м.н.
e-mail: nazar.kudryashkin@mail.ru стр. 258

Михайлов Максим Александрович, магистрант 1 года обучения
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
Повышения точности однопозиционного местоопределения источников радиоизлучения в декаметровом диапазоне волн для трассы Москва-Ростов-на-Дону путем коррекции модели IRI по ПЭС
Вертоградов Геннадий Георгиевич, д.ф.-м.н.
e-mail: mmih@sfedu.ru стр. 259

Павленко Михаил Андреевич, магистрант 1 года обучения
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
Полосно-пропускающий фильтр на тонких резонансных диафрагмах
Крутиев Сергей Владимирович, к.ф.-м.н.
e-mail: mpavlenko@sfedu.ru стр. 261

Панова Анастасия Владимировна, 4 курс
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
Прохождение и излучение электромагнитной волны в системе релаксор-МПЛ с зазором
Сидоренко Евгений Никифорович, к.ф.-м.н.
e-mail: nastya.shaprinskaya@mail.ru стр. 262

Сдобнова Варвара Павловна, магистрант 1 года обучения
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
Компактный полосно-пропускающий фильтр, выполненный по SIW-технологии
Крутиев Сергей Владимирович, к.ф.-м.н.
e-mail: sdobnova@sfedu.ru стр. 263

Харченко Диана Геннадьевна, магистрант 1 года обучения
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
Волноводный полосно-пропускающий фильтр на толстых металлических диафрагмах
Крутиев Сергей Владимирович, к.ф.-м.н.
e-mail: i@dharchenko.ru стр. 264

Чучук Тамара Алексеевна, 4 курс
Новосибирск, Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера, физический
Модуль блокировок и мониторинга системы импульсного питания
Крылов Андрей Александрович
e-mail: tamara.chuchuk@gmail.com стр. 265

Шевченко Андрей Константинович, магистрант 1 года обучения
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
Компактный волноводный полосно-пропускающий фильтр на толстых металлических диафрагмах
Крутиев Сергей Владимирович, к.ф.-м.н.
e-mail: ash@sfnedu.ru стр. 266

Сравнение методов модуляции сигналов в спутниковых системах связи

Бармин Никита Михайлович

Южный федеральный университет

Иванова Ирина Николаевна, к.ф.-м.н.

niki.barmin@yandex.ru

В спутниковых системах передачи данных очень важно передавать как можно больше информации с как можно меньшей вероятностью ошибок при небольших энергетических затратах. В системах спутниковой связи в основном приходится модулировать цифровой поток данных в аналоговый сигнал, передавать с помощью передатчика на антенне и демодулировать на приемнике в конечной точке приема. Поэтому, в таких системах чаще всего предпринимают манипуляции над сигналами [1].

PSK – вид манипуляции, при которой фаза несущего колебания меняется скачкообразно в зависимости от информационного сообщения. Фазовая манипуляция является хорошо помехоустойчивой.

QAM – разновидность амплитудной модуляции сигнала, которая представляет собой сумму двух несущих колебаний одной частоты, но сдвинутых по фазе относительно друг друга на 90 градусов, каждое из которых модулировано по амплитуде своим модулирующим сигналом.

FSK – вид манипуляции, при которой скачкообразно изменяется частота несущего сигнала в зависимости от значений символов информационной последовательности. Частотная манипуляция весьма помехоустойчива, поскольку помехи искажают в основном амплитуду, а не частоту сигнала.

Для сравнения типов манипуляции воспользуемся средой математического моделирования MATLAB.

Имеет смысл сравнивать виды манипуляции с равным числом позиций. Поэтому будем сравнивать сигналы с MFSK, MPSK, MQAM при числе уровней сигнала $M = 16, 32$ на уровнях «сигнал/шум» E_b/N_0 равном от 0 до 30 дБ, рисунки 1, 2. Это значит, что на один символ приходится 16 и 32 бит информации.

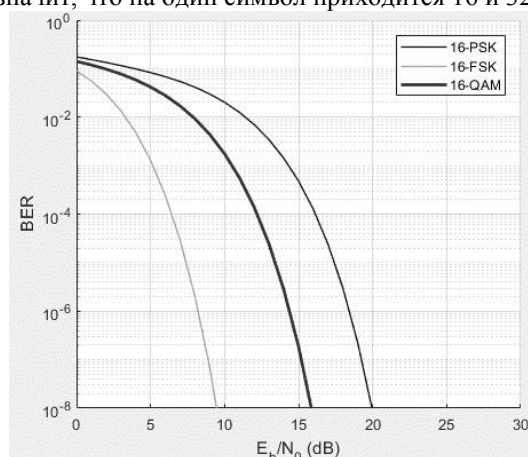


рис 1. График зависимости BER от E_b/N_0 для 16PSK, 16FSK, 16QAM.

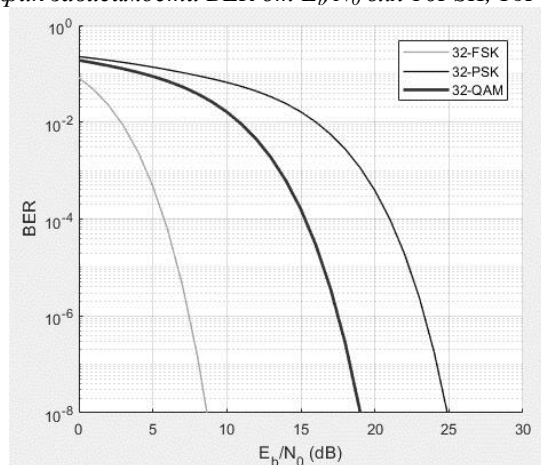


рис 2. График зависимости BER от E_b/N_0 для 32PSK, 32FSK, 32QAM.

В соответствии с приведенными результатами можно сделать вывод, что манипуляция MFSK будет выигрывать MPSK и MQAM по энергетической эффективности, так как в этом типе модуляции для передачи

информации с максимально меньшим количеством ошибок требуется меньше отношение «сигнал/шум» чем другим типам. Но на практике MFSK используется реже, ввиду того что в ССС ограниченная частотная полоса передачи данных, а при увеличении числа уровней спектр манипулированного сигнала по MFSK будет расширяться, так как новые частоты и ширина спектра растут по закону: $\frac{M}{\log_2 M}$, где M – число уровней [2]. Поэтому, метод манипуляции FSK чаще всего используют в системах передачи с низкими скоростями, где не является важным количество передаваемых символов за единицу времени.

Надо подчеркнуть, что увеличение числа уровней модуляции увеличивает спектральную эффективность в $K = \log_2 M$ раз, но это приводит к уменьшению энергетической эффективностью из-за увеличения E_b/N_0 [3]. Поэтому, для устройств, работающих в ССС, стоит выбирать тип манипуляции между MPSK и MQAM.

Теоретическую максимальную энергетическая эффективность полосы частот системы можно определить по параметру K, который показывает сколько бит передается в секунду. Соответственно, чем больше K, тем больше бит мы можем передавать за единицу времени. Практическая же величина будет отклоняться от этой величины. [4].

Кроме того, помехозащищенность типов манипуляции можно определить численно по расстоянию между соседними точками сигнального созвездия. Расстояние между точками в созвездии MPSK меньше чем в MQAM, а значит есть большая вероятность ошибки детектирования соседнего символа. В [5] было показано, что расстояние между соседними точками в системе с QAM с L уровнями модуляции определяется выражением:

$$d = \frac{\sqrt{2}}{(\log_2 2^M) - 1} \quad (1)$$

Аналогично для PSK:

$$d = 2 * \sin\left(\frac{\pi}{M}\right) \quad (2)$$

Где M - число фаз. При M = 16 $d_{QAM} = 0.47$, $d_{PSK} = 0.396$, при M = 32 $d_{QAM} = 0.28$, $d_{PSK} = 0.174$.

Таким образом QAM по сравнению с PSK оказывается эффективнее и более помехоустойчив. Это позволяет использовать более многоуровневую модуляцию при одинаковом отношении «сигнал/шум»

На практике используют большие значения M, вплоть до 1024QAM. Такие виды манипуляции позволяют достичь очень высокой спектральной эффективности. Так как информация кодируется по фазе и амплитуде, то к M-QAM предъявляют высокие требования к параметрам усилителей мощности [6]. К минусам модуляции MQAM относится то, что из-за увеличения числа изменяемых параметров сильно усложняется и дорожает конструкция модемов.

Таким образом можно сделать вывод: 1) При небольшом уровне модуляции $M \leq 4$ следует использовать QPSK манипуляцию ввиду оптимальной энергетической эффективности BER к отношению «сигнал/шум». 2) При уровне модуляции $M > 4$ следует применять MQAM ввиду оптимальных показателей помехоустойчивости при декодировании информации.

Список публикаций:

- [1] Камнев В. Е. // *Спутниковые сети связи*. – М.: Альпина Паблишер – 2004. – 536 с.: ил
- [2] Сомов А. М. // *Спутниковые системы связи: Учебное пособие для вузов*. – М.: Горячая линия – Телеком, 2012. – 244 с.: ил
- [3] Скляр Б. // *Цифровая связь. Теоретические основы и практические применение*. – М.: Издательский дом «Вильямс» - 2003. - 1104 с.: ил
- [4] Саркисов Д. Б., Баранников Л. Н. // *Методы модуляции и спектральные характеристики сигналов в многоканальных радиосистемах передачи информации: учебное пособие*. – М.: Московский авиационный институт – 2005. – 15 с.: ил
- [5] Wagner R., Reil M. // *Модуляция и формирование сигналов с помощью генераторов сигналов компании R&S: обучающие материалы* – М: Rohde & Schwarz GmbH & Co. KG/ - 2015. – 120 с.: ил
- [6] Галкин В. А. // *Цифровая мобильная радиосвязь*. – М: Горячая линия – Телеком, 2007. – 594 с.: ил

Полосно-пропускающий SIW-фильтр

Гризодуб Алексей Николаевич

Южный федеральный университет

Крутыев Сергей Владимирович, к.ф.-м.н.

agrizodub@sfedu.ru

В связи с развитием новых поколений мобильной связи (5G), интернет вещей (IoT) и т.п., - возрастает спрос на высокопроизводительные, недорогие и компактные устройства. Наиболее подходящей технологией для реализации этих устройств считается встроенный в подложку волновод (SIW). Благодаря интеграции классических волноводных компонентов в плоской форме, технология SIW обеспечивает: простоту изготовления, компактные размеры, малый вес, а также хорошие электромагнитные характеристики [1–3].

В этой статье представлен фильтр, основанный на полумодовых резонаторах SIW с внешними полюсами. Структура состоит из двух встроенных полумодовых областей SIW, соединённых между собой окном с заглушкой в центре, представленной в виде микрополосковой линии с открытым концом. Топология фильтра представлена на рис. 1 [4, 5].

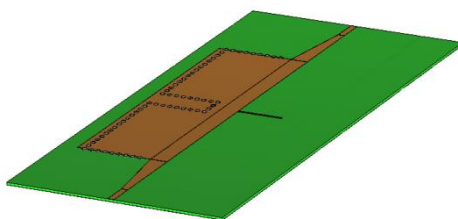


рис.1 – Топология фильтра

Наличие микрополосковой заглушки даёт двойной эффект. Во-первых, позволяет добавить передающий полюс за счёт резонансной связи. Во-вторых, она определяет нулевую передачу на частоте, где длина заглушки равна четверти длины волны.

Устройство смоделировано на подложке с относительной диэлектрической проницаемостью $\epsilon = 2.2$ и толщина подложки $h = 0.51$ мм, толщина металлизации 35мкм. Амплитудно-частотная характеристика фильтра представлена на рис. 2.

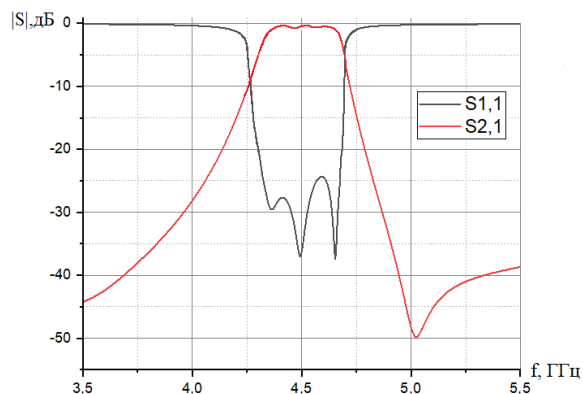


рис. 2 – Амплитудно-частотная характеристика фильтра

Список публикаций:

- [1] Krutiev, S., Lonkina, D., Makhno, A., Sdobnova, V. Synthesis of Band-Pass Filters Made Using SIW Technology // 2022 International Conference on Actual Problems of Electron Devices Engineering, APEDE 2022, 2022, pp. 118–122
- [2] Krutiev, S., Lonkina, D., Makhno, P., Sdobnova, V. Narrow-Band Waveguide Filter on Complex Resonant Diaphragms // 2022 International Conference on Actual Problems of Electron Devices Engineering, APEDE 2022, 2022, pp. 108–111
- [3] Гадзиева, А.А., Заргано, Г.Ф., Земляков, В.В., Крутыев, С.В., SIW-технологии, история создания, современное состояние и перспективы развития // Физические основы приборостроения, 2012. – Т. 1. – № 4. – С. 4–13.
- [4] Заргано, Г.Ф., Ляпин, В.П., Михалевский, В.С. и др. Волноводы сложных сечений. - М.: Радио и связь, 1986. – 124 с.
- [5] Заргано, Г.Ф., Земляков, В.В. Электродинамический анализ и синтез селективных устройств на волноводах сложного сечения для современных антенно-фидерных систем // Антенны, 2011. - Вып. 7 (170). – С. 64–73.

Моделирование диаграммообразующих устройств на основе метаповерхностей в ГГц диапазоне

Коноплев Артем Александрович
Южный федеральный университет
Клещенков Анатолий Борисович, к.ф.-м.н.
akonoplev@sfedu.ru

Метаматериалы - композитные материалы, свойства которых не встречаются в природе и достигаются за счет своей периодической структуры. На их основе конструируются метаповерхности – поверхности с необычными отражательными свойствами, состоящие из периодических структур с субволновой размерностью. Они имеют уникальные реконфигурируемые характеристики рассеяния и отражения, позволяющие создавать управляемые устройства радио и оптического диапазона и преодолевать фундаментальные ограничения. Метаповерхности отличаются малыми размерами, простотой интеграции и небольшой стоимостью. Метаповерхности широко применяются в таких устройствах как поляризаторы, отражатели, для создания голограмм и других сферах. Эта технология позволяет создавать легкие малогабаритные антенны для внушительного перечня задач ^{[1][3]}. Настоящая работа посвящена исследованию возможности применения метаповерхностей для антенн мм-диапазона. В работе в пакете CST MW Studio проведено моделирование некоторых двумерно-периодических структур. В качестве базовых элементов структур выбраны элементы в форме простых геометрических фигур. Проведено исследование модулей и фазы коэффициентов пропускания и отражения в зависимости от геометрии элементов.

Для нужд радиолокации применяются два варианта поворота диаграммы направленности (ДН) сканирующей антенны: механический и электронный. Оба варианта имеют как положительные, так и отрицательные моменты. В преимущества электронных сканеров можно отнести небольшие размеры, низкое энергопотребление и высокую скорость сканирования. Применение метаповерхностей даёт возможность развить эти преимущества. Представленная в работе модель активной фазированной антенной решетки (АФАР) позволяет управлять ДН с высокой скоростью ^{[2][4]}.

Для моделирования цифровой метаповерхности был выбран элемент со следующими характеристиками. Нижний слой диэлектрика состоит из текстолита (FR-4) с толщиной 0.058мм. Подложка состоит из идеального проводника с толщиной 0.018мм. Верхний диэлектрик состоит из материала Rogers RO4350B с толщиной 0,222мм. Патчи из идеального проводника с толщиной 0,018 мм, стороной квадрата 0,607мм. Паз с толщиной 0,012мм. Изменение геометрии обеспечивается за счет переключки с управляемой проводимостью. Предложенная структура позволяет управлять фазой коэффициента отражения. Был получен сдвиг фазы отраженной волны для элемента с рассоединенными антеннами и с соединенными. Для данных моделей сдвиг фазы составил 180 градусов. Модели продемонстрированы на рисунках 1 и 2, а на рисунке 3 представлены результаты расчетов частотных зависимостей фазового угла коэффициента отражения для двух дискретных состояний элемента – при наличии и отсутствии проводимости в переключке.

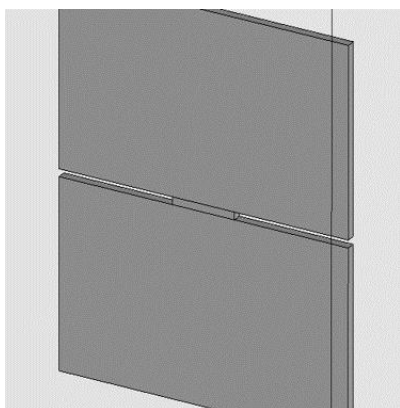


рис.1. «соединенные» антенны

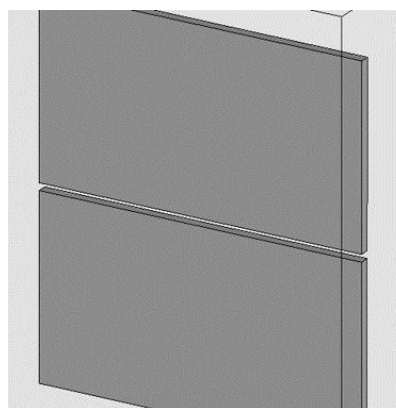


рис.2. «разъединенные» антенны

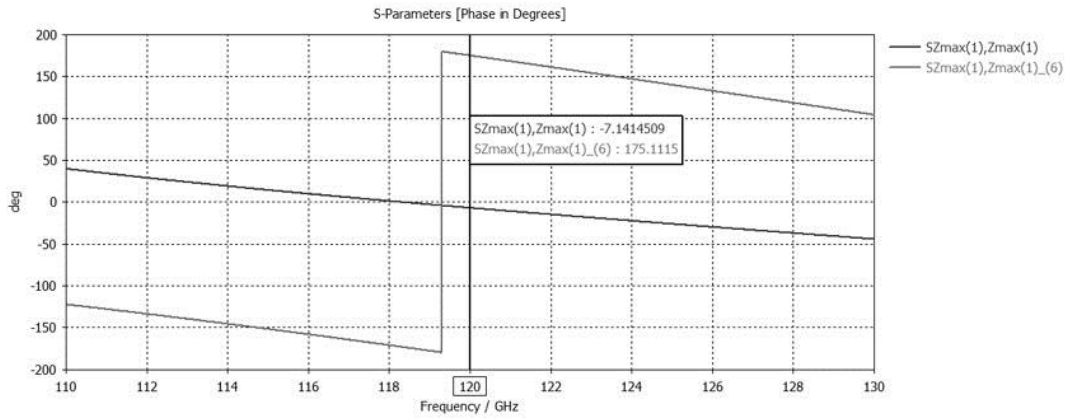


рис.3. разность фаз для моделей элементов

Для построения АФАР был смоделирован элемент, представляющий из себя квадрат из текстолита со стороной 1,25мм и толщиной 0,22мм с нанесенными металлическими прямоугольными антеннами 0,5x0,5мм с одной стороны и сплошного металлического экрана с другой стороны. Все металлические покрытия имеют толщину 0,018мм. Модель показана на рисунке 4.

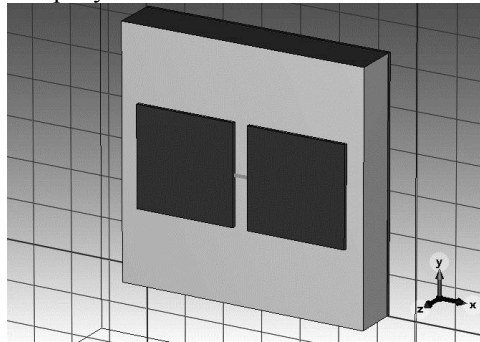


рис.4. представлен элемент АФАР

Был проведен электродинамический анализ модели АФАР с фазовой манипуляцией волны. Была выявлена зависимость изменения направления ДН в зависимости от распределения фаз по элементам. Анализ полученных результатов позволяет создать электронный отражатель для радара на частоте 120 ГГц продемонстрирован на рисунках 5-6. Получены наклоны в 1, 5 и 10 градусов.

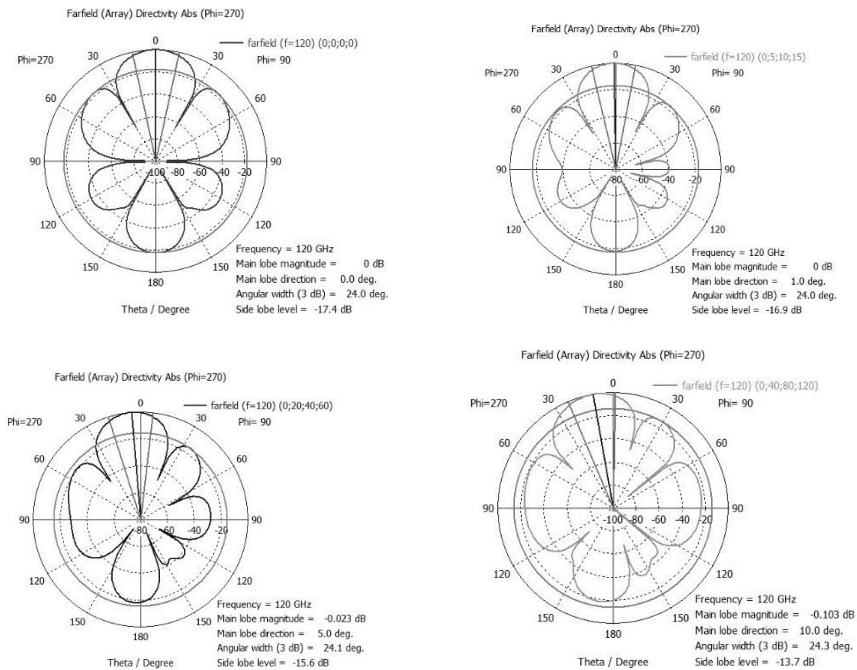


рис.2-5. Изменение угла ДН путем фазовой манипуляции

Список публикаций:

- [1] Roadmap on metasurfaces Oscar Quevedo-Teruel et al 2019 J. Opt. 21 073002.
 [2] Electronic Beam-steering Using 1-Bit Digital. Reflective Metasurface at Ka Band Jiaqi Han, Guangyao Liu, Yan Shi, and Long Li Xi'an 710071, China
 [3] Ke Chen, Zhongjie Yang, Yijun Feng, a Bo Zhu, Junming Zhao, and Tian Jiang AIP Advances 5, 067152 (2015)
 [4] Raeker B and Grbic A 2018 Paired metasurfaces for amplitude and phase control of wavefronts IEEE Int. Symp. on Antennas and Propagation (Boston, MA)

Расчёт уширения спектральной линии излучения в дискретных моделях автоколебаний

Кудряшкин Назар Андреевич

Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева

Зайцев Валерий Васильевич, к.ф.-м.н.

nazar.kudryashkin@mail.ru

При математическом моделировании радиоэлектронных систем часто встречаются квазигармонические случайные процессы, воспроизводящие сигналы реальных систем. Из-за флуктуаций сигналов форма их спектральных линий подвержена различным изменениям. Флуктуации частоты вызывают уширение спектральной линии, а флуктуации амплитуды – формирование пьедестала линии. Для описания механизма уширения в динамическую систему введено внешнее случайное воздействие. В данном случае дискретные автоколебания генерируются с учётом воздействия на осциллятор полосового белого шума. Это воздействие реализовано двумя способами.

В первом случае (аддитивная модель) дискретная стохастическая система представлена уравнениями (1). Вывод и подробное описание аддитивной модели (дискретного осциллятора томсоновского типа) рассмотрены в [1, 2].

$$\begin{cases} x_n - 2 \cos(2\pi\Omega_0)x_{n-1} + x_{n-2} = 2\pi\nu(pS(x_{n-1}) - 1)\dot{x}_{n-1} + \mathcal{E}\xi_{n-1}, \\ \dot{x}_{n-1} = \cos(2\pi\Omega_0)x_{n-1} - x_{n-2} \end{cases}, \quad (1)$$

где Ω_0 – собственная частота осциллятора, $\nu = \Omega_0 / Q$ – его полоса пропускания, Q – добротность, p – параметр превышения порога генерации, $S(x)$ – дифференциальная крутизна. Слагаемое $\mathcal{E}\xi_n$ описывает дискретный белый шум ξ_n с амплитудой \mathcal{E} .

При оценке спектральной плотности мощности (СПМ) сигнала (1) было выявлено, что спектральная линия содержит как амплитудные флуктуации, так и фазовые. На рис.1 представлено сравнение (в логарифмическом масштабе) спектральных линий в анализируемой модели, и в модели без шумового воздействия. Из рисунка видно подтверждение теоретических предположений о том, как именно влияют на спектральную линию амплитудные и частотные (фазовые) флуктуации.

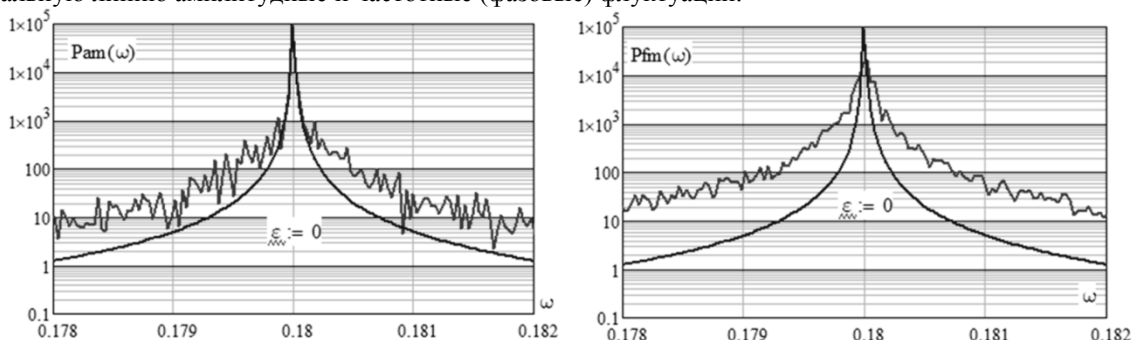


рис.1. Оценка СПМ сигнала, модулированного по амплитуде (слева) и по фазе (справа).

Во второй (параметрической) модели введём шумовое воздействие на частоту. Получим уравнение (2):

$$\begin{cases} x_n - 2 \cos(2\pi(\Omega_0 + \mu\xi_{n-1}))x_{n-1} + x_{n-2} = 2\pi\nu(pS(x_{n-1}) - 1)\dot{x}_{n-1}, \\ \dot{x}_{n-1} = \cos(2\pi\Omega_0)x_{n-1} - x_{n-2} \end{cases}, \quad (2)$$

где $\mu\zeta_{n-1}$ характеризует шумовое воздействие. При оценке СПМ было выявлено, что модель (2) позволяет генерировать автоколебания, свободные от флуктуаций амплитуды.

Оценка СПМ также позволила определить, что в обоих случаях форма спектральных линий совпадает с лоренцевой формой однородно уширенной линии. При этом относительная ширина по порядку величины соответствовала $1/Q$.

Соответствие между теоретическими и экспериментальными данными говорит о том, что предложенные модели автоколебательных систем с однородно уширенной спектральной линией позволяют описать реальные источники сигналов в численных экспериментах.

Список публикаций:

[1] Зайцев В. В. Дискретный осциллятор ван дер Поля: Конечные разности и медленные амплитуды // Известия вузов. Прикладная нелинейная динамика. 2017. Т. 25, № 6. С. 70–78. DOI: 10.18500/0869-6632-2017-25-6-70-78.

[2] Зайцев В. В., Карлов А. В. Томсоновские автогенераторы в дискретном времени: синтез динамических систем. // Журнал радиоэлектроники [электронный журнал]. 2022. №3. DOI: 10.30898/1684-1719-2022-3-1.

Повышение точности однопозиционного местоопределения источников радиоизлучения в декаметровом диапазоне волн для трассы Москва-Ростов-на-Дону путем коррекции модели IRI по ПЭС

Михайлов Максим Александрович

Черных Владимир Дмитриевич

Южный федеральный университет

Вертоградов Геннадий Георгиевич, д.ф.-м.н.

mmih@sfedu.ru

На сегодняшний день для решения практических и научных задач распространения радиоволн в ионосфере являются актуальным определение местоположения источника радиоизлучения (ИРИ) в диапазоне декаметровых волн (ДКМВ) [1]. Для однопозиционного определения положения источника излучения (ИРИ) в ДКМВ достаточно из одного приёмного пункта (одной позиции) измерить углы прихода хотя бы одного луча от источника и задать каким-либо способом ионосферную обстановку (пространственное распределение электронной концентрации [2]). Погрешности местоопределения ИРИ при использовании прогностической модели IRI исследованы экспериментально многими авторами, в том числе и в работах [2-4]. В тоже время для решения указанных задач тестирование эффективности коррекции ионосферной модели по полному электронному содержанию (ПЭС или ТЕС) изучено только на основе имитационного моделирования [5].

а)

б)

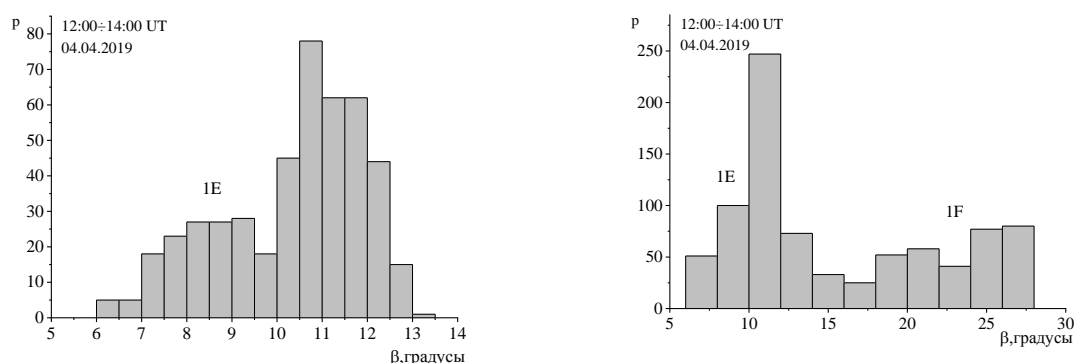


рис. 1. Гистограммы распределения углов места прихода ДКМВ на частоте 9996 кГц для трассы Москва – Ростов-на-Дону без коррекции по ТЕС (а) и с коррекции по ТЕС (б).

В экспериментах использован многоканальный широкоапертурный комплекс измерения углов ДКМВ. Круговая антенная решетка диаметром 200 м построена из 16 активных антенных элементов высотой 2.5 м размещена вблизи Ростова-на-Дону. В качестве контролируемых ИРИ были выбраны станция точного времени РВМ, работающая непрерывно на частоте 9996 кГц (длина трассы – 949.0 км, азимут – 352.8°). Измерения проводились в спокойных ионосферных условиях. Для разделения поля КВ на парциальные лучи и моды, в

работе использован способ, предполагающий одновременно спектральную обработку во временной и пространственной областях [2,3]. Способ основан на методе MUSIC [6].

Обработка результатов измерений углов прихода предполагала деление суток на часовые интервалы. На каждом часовом интервале с учетом решения задачи однопозиционного местоопределения строились гистограммы распределений для углов прихода. При построении гистограмм участвовали только те измерения, для которых удавалось с использованием модели IRI выполнить оценку дальности до ИРИ. Примеры полученных гистограмм показаны на рис.1. С помощью гистограмм выполнялась селекция результатов измерений углов прихода по модам распространения. После этого определялись наиболее вероятные углы прихода: азимут трассы – α и угол места – Δ парциальных мод распространения, а также среднеквадратичное отклонение относительно географического азимута σ_α и вероятных углов места σ_Δ .

Для различных частот E и F мод распространения находились: среднеквадратичное отклонение σ_α оценочного азимута трассы α от истинного значения α_0 , относительное среднеквадратичное отклонение расстояния до ИРИ σ_S/S_0 от истинного значения S_0 . Результаты, полученные для нескольких часовых интервалов, приведены в таблице 1. Здесь указаны также объемы выборок - N , по которым получены результаты, помещенные в таблицу. Эта колонка иллюстрирует вероятность оценки координат ИРИ однопозиционным методом после адаптации ионосферной модели по полному электронному содержанию. Видно, что в условиях минимальной солнечной активности коррекция по ТЕС существенно увеличивает вероятность оценки координат ИРИ, особенно для распространения сигналов F модой. Например, в условиях минимума солнечной активности, на трассе Москва–Ростов-на-Дону без адаптации модели IRI практически не удавалось получить оценки координат при отражении от слоя F-ионосферы. По этим причинам в таблице 1 отсутствуют строки усредненных оценок F-мод распространения в случае, когда коррекция по ТЕС не выполнялась.

Результаты оценки углов прихода и дальности до источника представлены в следующей таблице:

Полдень (10:00 -14:00 UT). $f = 9996$ кГц							
Коррекция	Мода	σ_S	σ_α	σ_Δ	$\langle \Delta \rangle$	σ_S/S_0	N
Отсутствует	E	100.2	0.6	1.7	10.3	9.3	1160
	F	-	-	-	-	-	
ТЕС	E	112.8	0.6	2.0	10.7	9.5	1425
	F	156.2	1.4	4.2	22.9	15.8	
Заход (14:00 -18:00 UT). $f = 9996$ кГц							
Отсутствует	E	-	-	-	-	-	718
	F	-	-	-	-	-	
ТЕС	E	-	-	-	-	-	1305
	F	88.8	0.8	3.9	28.7	9.0	

На основе измерений углов прихода на двух среднеширотных трассах различной протяженности и ориентации в условиях разделения скачковых 1E и 1F мод распространения показано, что девиации углов места парциальных лучей достигают в азимутальной плоскости $\sim 0.5^\circ$ для 1E и $\sim 2^\circ$ для 1F мод, а в угломестной – значений $\sim 1^\circ$ для 1E и 4.5° для 1F мод. Столь существенные вариации углов места 1F мод связаны с присутствием в ионосфере перемещающихся ионосферных возмущений. Коррекция ионосферной модели по экспериментальным значениям вертикального ТЕС позволяет в условиях минимума солнечной активности существенно повысить вероятность оценки координат ИРИ, особенно при отражении сигналов от F-слоя ионосферы.

Список публикаций:

- [1] Gething P. J. D. *Radio direction finding and superresolution*. –London: Peter Peregrinus Ltd, 1990. –365p.
- [2] Вертоградов Г. Г., Урядов В. П., Чайка Е. Г., Валов В. А., Выборнов Ф. И., Першин А. В., Стародубровский А. С. Однопозиционное определение местоположения источников радиозлучения в декаметровом диапазоне с помощью широкоаперт-го пеленгатора-дальномера и ТЧМ-иозонда-радиопеленгатора//Радиофизика, 2017, Т.60, № 12. С.1072-1092.
- [3] Вертоградов Г. Г., Чайка Е. Г. Оценка точности однопозиционного местоопределения на среднеширотных трассах при различных способах задания ионосферной обстановки// Радиотехника, 2016, № 11. –С.217-224.
- [4] Lay K. A real-time HF Single-Station Location system deve// Radar, 2008 International, Adelaide, Australia, 2008. –Рр.309-310.
- [5] Мальцева О.А., Родионова В.Т., Шлюпкин А.С. Использование полного электронного содержания для текущей диагностики состояния ионосферного канала связи// Геомагнетизм и аэрономия. – 2005, –Т.45. – С.480-486.
- [6] Ратынский М. В. Адаптация и сверхразрешение в антенных решетках. –М.: Радио и связь, 2003. –200 с.

Полосно-пропускающий фильтр на тонких резонансных диафрагмах

Павленко Михаил Андреевич

Южный федеральный университет

Крутиев Сергей Владимирович, к.ф.-м.н.

mpavlenko@sfedu.ru

В данной работе представлена конструкция волноводного полосно-пропускающего фильтра. Апертура диафрагмы основана на ступенчатых пазах, которые играют роль фильтрующих секций. Ступенька на щели от стенки до стенки обеспечивает резонанс передачи в пределах одномодовой полосы прямоугольного волновода.

Был проведен электродинамический анализ одиночной ступенчатой диафрагмы, а также синтез полосно-пропускающего фильтра на тонких резонансных диафрагмах. На рис 1 представлена трехмерная модель ППФ. На рис.2 представлена АЧХ синтезированного ППФ.

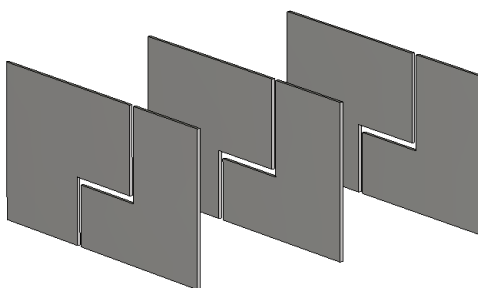


рис.1 Полосно-пропускающий фильтр на ступенчатых диафрагмах

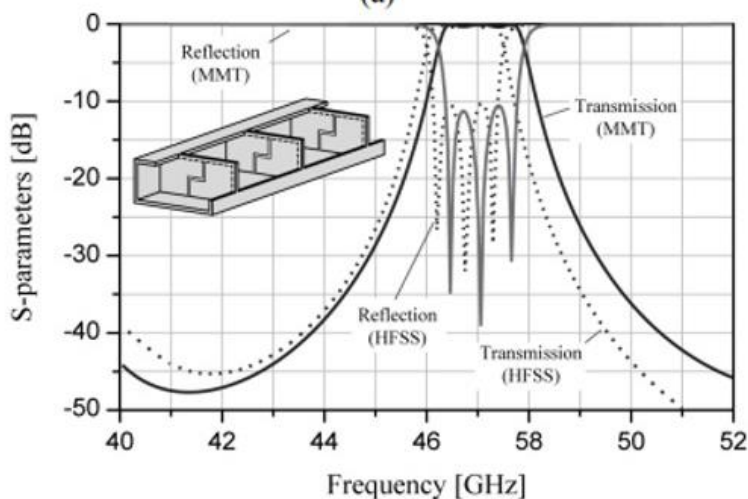


рис. 2. Амплитудно-частотная характеристика синтезированного фильтра

Список публикаций:

- [1] X. Chen, K. Wu, and Zh. Li, "Dual-Band and Triple-Band Substrate Integrated Waveguide Filters With Chebyshev and Quasi-Elliptic Responses" *IEEE Trans. Microw. Theory*, VOL. 55, NO. 12, PP. 2569-2578, 2007.
- [2] Sergey V. Krutiev; Daria V. Lonkina; Svetlana S. Efremova; Andrey S. Ipatiev *Electrodynamical Analysis and Synthesis of Band-pass Filters on a Rectangular Waveguide with Complex Thin Resonant Diaphragms in the Form of a Double-Shaped C-aperture // 2021 Radiation and Scattering of Electromagnetic Waves (RSEMW)*, 28 June 2021 - 02 July 2021, DOI: 10.1109/RSEMW52378.2021.9494046
- [3] S. V. Krutiev; D. V. Lonkina; P. V. Makhno; A. B. Kleshchenkov; V. V. Makhno *Design and Fabrication of Compact Waveguide Filter with Complementary Split-ring Resonators (CSRR) // 2022 Photonics & Electromagnetics Research Symposium (PIERS)*, 25-29 April 2022, DOI: 10.1109/PIERS55526.2022.9792588
- [4] Zemlyakov, V.V., Zargano, G.F., Krutiev, S.V., Tyaglov, M.Y. *Electrodynamical Analysis and Synthesis of an Elliptic Filter Based on Complex Resonant Irises in a Rectangular Waveguide // Radiophysics and Quantum Electronics*, 2019, 61(12), pp. 915–923, DOI: <https://doi.org/10.1007/s11141-019-09947-0>
- [5] Viacheslav Zemlyakov, Sergey Krutiev, Mikhail Tyaglov, Valery Shevchenko *A design of waveguide elliptic filter based on resonant diaphragms with a complex aperture // International Journal of Circuit Theory and Applications*, 2019, 47(1), pp. 55–64, DOI: <https://doi.org/10.1002/cta.2566>

Прохождение и излучение электромагнитной волны в системе релаксор-МПЛ с зазором

Панова Анастасия Владимировна

Сабурова Валерия Сергеевна

Южный федеральный университет

Сидоренко Евгений Никифорович, к.ф.-м.н.

nastya.shaprinskaya@mail.ru

В технике СВЧ совместное использование диэлектрических резонаторов и микрополосковой линии (МПЛ) позволяет конструировать ответвители СВЧ энергии с электромеханической регулировкой их резонансной частоты, ширины полосы пропускания, добротности. А совместное применение микрополосковых линий разного типа и диэлектрических резонаторов с различными свойствами и формами способствует созданию малогабаритных перспективных диэлектрических резонаторных антенны (ДРА), широко применяемых в настоящее время.

В данной работе экспериментально исследованы свойства волноводного тракта, содержащего несимметричную микрополосковую линию (МПЛ) с резонатором между зазорами микрополоска на диэлектрической подложке на прохождение и излучение электромагнитных волн (рис.1). В качестве резонатора используется оптически прозрачная сегнетоэлектрическая керамика PLZT. Она представляет собою твердый раствор сегнетоэлектрика титаната свинца (PbTiO_3) и антисегнетоэлектрика цирконата свинца (PbZrO_3), модифицированный лантаном с концентрацией La 9%. Эта керамика обладает сочетанием пьезоэлектрических и электрооптических свойств и является базовым материалом для устройств и приборов электроники, оптоэлектроники, механики.

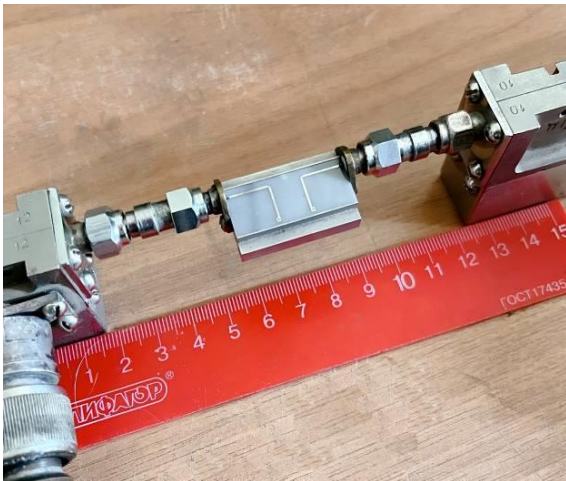


рис.1. Фотография несимметричной микрополосковой линии в волноводном тракте.

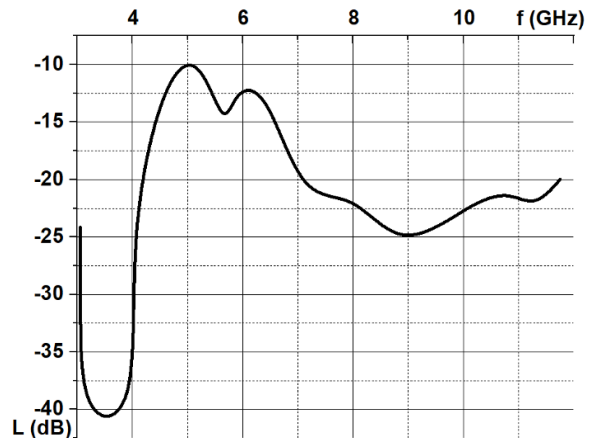


рис.2. Спектр поглощения СВЧ энергии несимметричной микрополосковой линией с ЦТСЛ-резонатором.

Измерительная установка, как и ранее [1, 2], содержала три генератора качающейся частоты, индикатор КСВН и ослабления, а также несимметричную микрополосковую линию. Патч-элемент МПЛ представлял собою систему двух медных проводников в виде полосок Г-образной формы шириной 1 мм. Расстояние между ними в области разрыва 8 мм. МПЛ была нагружена 50-омной нагрузкой. Таким образом, линия работала в режиме бегущей волны. Исследуемый образец ЦТСЛ размещался между параллельными разомкнутыми концами проводников в пучности E электрической составляющей СВЧ поля.

При отсутствии образца на поверхности МПЛ волноводный тракт разорван и измеритель КСВН фиксирует -50 дБ поглощения. Полученные спектры поглощения энергии системы МПЛ-диэлектрический резонатор представлены на рис. 2. Максимальное поглощение ($L = -40$ дБ) наблюдается в диапазоне частот 3–4 ГГц из-за большого поглощения или отражения энергии. Следовательно, связь между МПЛ и резонатором в этом диапазоне частот отсутствует. Зато в области частот 5–6 ГГц благодаря возбуждению диэлектрического резонатора появилась зона с поглощением энергии менее -10 ... -15 дБ, где реализуется режим бегущей волны.

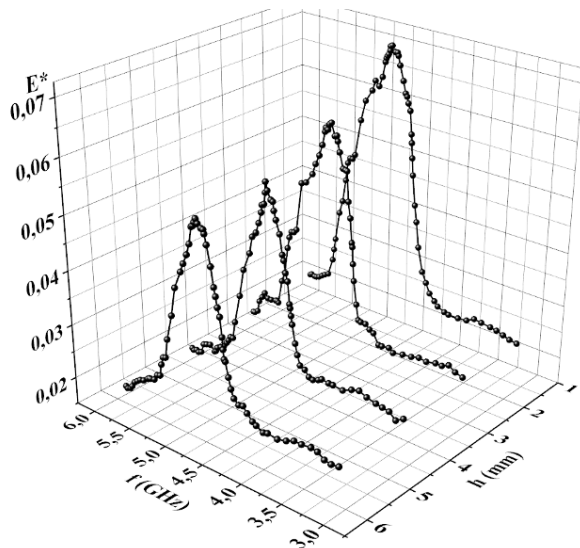


рис.3. Спектры интегрального излучения напряженности электрического поля на разных высотах h от поверхности образца.

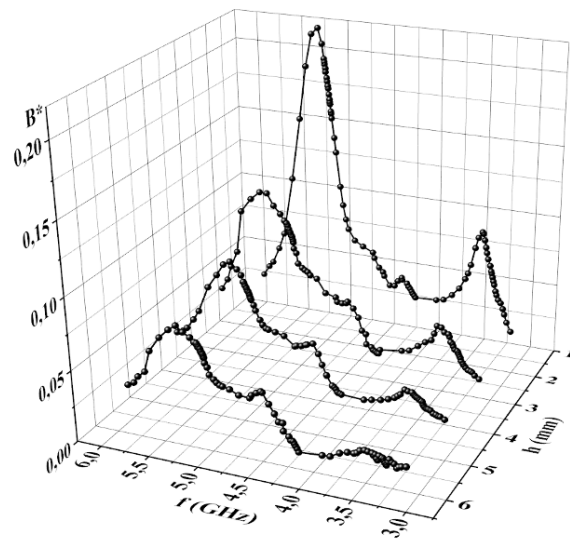


рис.4. Спектры интегрального излучения индукции магнитного поля на разных высотах h от поверхности образца.

С помощью штыревой и петлевой антенн измерены спектры интегрального излучения напряженности электрического (рис.3) и магнитного поля (рис.4) на разных высотах h от верхней поверхности керамического образца. На частоте ~ 5 ГГц наблюдается максимум излучения и электрического и магнитного полей. Максимальная высота, на которой еще фиксируется напряжение детектированного излучаемого сигнала цифровым вольтметром (без усилителя) равно 8-10 см. Мощность излучения в максимуме составляет 10% выходной мощности генератора.

Таким образом, экспериментально показано, что система несимметричная микрополосковая линия – ЦТСЛ резонатор обладает свойствами фильтра и диэлектрической резонаторной антенны.

Список публикаций:

[1] Sidorenko E.N., Chan Thi Beat Ngoc, Prikhodko G. I., Natkhin I.I., Shloma A.V., Kharchenko D.V.// *Journal of Advanced Dielectrics* Vol. 10, No. 01n02, 2020. P.2060020 - 2060027

[2] Sidorenko E.N., Rudskaya A. G., Agarkova M. E., Rudsky D. I., Panova A. V.// *Abstracts of 10th Anniversary International Conference on "Physics and Mechanics of New Materials and Their Applications" (PHENMA 2021–2022) Divnomorsk, Russia, 2022* P. 283-284.

Компактный полосно-пропускающий фильтр, выполненный по SIW-технологии

Сдобнова Варвара Павловна
Крутыев Сергей Владимирович
 Южный федеральный университет
 Крутыев Сергей Владимирович
sdobnova@sfedu.ru

Современные технологии проектирования интегральных микросхем дают возможность интегрировать в структуру трехмерные элементы. Технология интегрирования волновода в подложку получила широкое распространение благодаря уменьшению массогабаритных размеров и относительно низкой стоимости производства по сравнению с твердотельными прямоугольными волноводами. Такая технология была названа SIW-технологией (от англ. Substrate Integrated Waveguide – интегрированный в подложку волновод) [1,2].

SIW представляет собой волноводную структуру, которая создана двумя рядами металлических штырей, соединяющих две металлические пластины, ограничивающие диэлектрическую подложку.

Данная технология приобрела большую популярность благодаря тому, что SIW-структура объединяет в себе преимущества классических прямоугольных волноводов (большая передаваемая мощность, малые потери, полностью экранированная структура, высокая добротность резонаторов) и особенности планарных структур, приобретаая малые размеры и вес, а также относительно низкую стоимость производства [3].

SIW-фильтры широко применяются в системах передачи информации, в средствах радиоэлектронной борьбы, а так же в спутниковых системах [4, 5].

Ранее был смоделирован трехслойный полосно-пропускающий фильтр без резонаторов и фильтр с одним [6]. В рамках данной работы был проведен электродинамический анализ и синтез трехслойного полосно-пропускающего фильтра с тремя резонаторами, выполненного по SIW-технологии, а также проанализирована его амплитудно-частотная характеристика, представленная на *рисунке 1*.

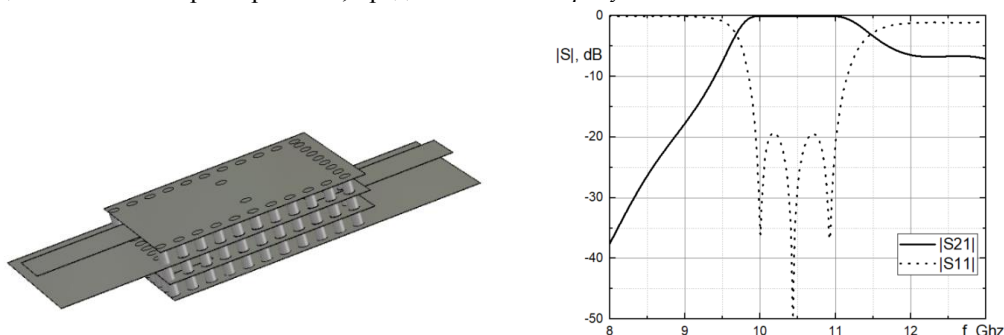


рис.1. Трехслойный SIW-фильтр с тремя резонаторами и его АЧХ.

Работа выполнена в Южном федеральном университете при поддержке Российского Научного Фонда, номер гранта № 22-79-00127 «Разработка гибких частотно-селективных устройств с применением SIW-технологии для спутников и беспилотных летательных аппаратов».

Список публикаций:

- [1] Krutiev, S., Lonkina, D., Makhno, A., Sdobnova, V. Synthesis of Band-Pass Filters Made Using SIW Technology // 2022 International Conference on Actual Problems of Electron Devices Engineering, APEDE 2022, 2022, pp. 118–122
- [2] Krutiev, S., Lonkina, D., Makhno, P., Sdobnova, V. Narrow-Band Waveguide Filter on Complex Resonant Diaphragms // 2022 International Conference on Actual Problems of Electron Devices Engineering, APEDE 2022, 2022, pp. 108–111
- [3] Гадзиева, А.А., Заргано, Г.Ф., Земляков, В.В., Крутыев, С.В., SIW-технологии, история создания, современное состояние и перспективы развития // Физические основы приборостроения, 2012. – Т. 1. – № 4. – С. 4–13.
- [4] Заргано, Г.Ф., Ляпин, В.П., Михалевский, В.С. и др. Волноводы сложных сечений. - М.: Радио и связь, 1986. – 124 с.
- [5] Заргано, Г.Ф., Земляков, В.В. Электродинамический анализ и синтез селективных устройств на волноводах сложного сечения для современных антенно-фидерных систем // Антенны, 2011. - Вып. 7 (170). – С. 64–73.
- [6] Sdobnova, V., Krutiev, S., Lonkina, D. Compact Three-layer Band-pass Filter Based on SIW-technology // Proceedings of the 2023 IEEE Conference of Russian Young Researchers in Electrical and Electronic Engineering. St.Petersburg, January 24-26, 2024. Pp. 141–143.

Волноводный полосно-пропускающий фильтр на толстых металлических диафрагмах

Харченко Диана Геннадьевна

Южный федеральный университет

Крутыев.Сергей Владимирович, к.ф.-м.н.

harchenko@sfedu.ru

Отдельным классом перспективных функциональных устройств СВЧ техники являются волноводные СВЧ фильтры. Микроволновые фильтры имеют широкий спектр применения в различных радиотехнических устройствах. Среди них приемные модули, передающие устройства, частота и устройства генерации сигналов, устройства развязки. Так как развитие систем связи требует увеличение частоты каналов, в настоящее время проектирование и разработка различных гибких микроволновых устройств, таких как направленные ответвители, фильтры, дуплексеры, делители мощности, антенны и т.д., является актуальной и важной задачей по обеспечению компактности и простоты использования [1-5].

В данной работе приводится электродинамический анализ фильтра с тремя диафрагмами, каждая из которых имеет по три прямоугольных щели. В работе был синтезирован полосовой фильтр третьего порядка, а затем был проведен его электродинамический анализ и синтез. На *рис. 1* показан внешний вид трехмерного фильтра, а на *рис.2* показана амплитудно-частотная характеристика фильтра. Толщина металлической диафрагмы составляет $w=1,5$ мм.

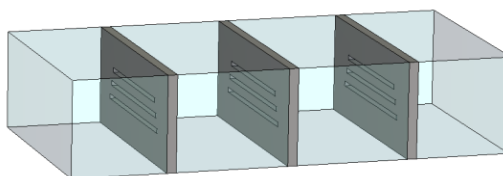


рис. 1 – Модель фильтра третьего порядка с тремя прямоугольными щелями

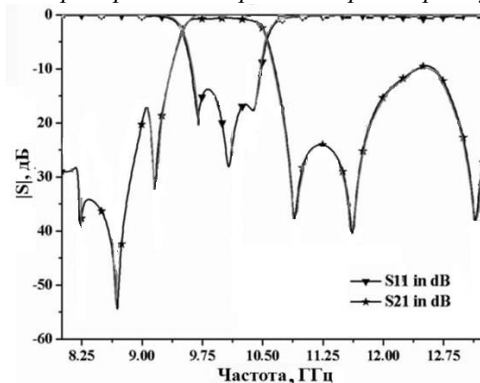


рис. 2 – Амплитудно-частотная характеристика фильтра третьего порядка с тремя прямоугольными щелями

Список публикаций:

[1] X. Chen, K. Wu, and Zh. Li, "Dual-Band and Triple-Band Substrate Integrated Waveguide Filters With Chebyshev and Quasi-Elliptic Responses" *IEEE Trans. Microw. Theory*, VOL. 55, NO. 12, PP. 2569-2578, 2007.

[2] Sergey V. Krutiev; Daria V. Lonkina; Svetlana S. Efremova; Andrey S. Ipatiev *Electrodynamic Analysis and Synthesis of Band-pass Filters on a Rectangular Waveguide with Complex Thin Resonant Diaphragms in the Form of a Double-Shaped C-aperture // 2021 Radiation and Scattering of Electromagnetic Waves (RSEMW)*, 28 June 2021 - 02 July 2021, DOI: 10.1109/RSEMW52378.2021.9494046

[3] S. V. Krutiev; D. V. Lonkina; P. V. Makhno; A. B. Kleshchenkov; V. V. Makhno *Design and Fabrication of Compact Waveguide Filter with Complementary Split-ring Resonators (CSRR) // 2022 Photonics & Electromagnetics Research Symposium (PIERS)*, 25-29 April 2022, DOI: 10.1109/PIERS55526.2022.9792588

[4] Zemlyakov, V.V., Zargano, G.F., Krutiev, S.V., Tyaglov, M.Y. *Electrodynamic Analysis and Synthesis of an Elliptic Filter Based on Complex Resonant Irises in a Rectangular Waveguide // Radiophysics and Quantum Electronics*, 2019, 61(12), pp. 915–923, DOI: <https://doi.org/10.1007/s11141-019-09947-0>

[5] Viacheslav Zemlyakov, Sergey Krutiev, Mikhail Tyaglov, Valery Shevchenko *A design of waveguide elliptic filter based on resonant diaphragms with a complex aperture // International Journal of Circuit Theory and Applications*, 2019, 47(1), pp. 55–64, DOI: <https://doi.org/10.1002/cta.2566>

Модуль блокировок и мониторинга системы импульсного питания

Чучук Тамара Алексеевна

Новосибирский национальный исследовательский государственный университет

Крылов Андрей Александрович

tamara.chuchuk@gmail.com

Импульсные источники питания (ИИП) для магнитных элементов ускорительных комплексов [1], предполагающие наличие больших ёмкостей, зараженных до высоких напряжений, являются опасными элементами с поражающим фактором электрического тока. Данная проблема стоит особенно остро, когда несколько независимых ИИП установлены в едином крейте. Возникает необходимость в создании общего модуля, следящего за безопасностью всех ИИП в стойке. Именно эта цель была поставлена в данной работе.

Согласно техническому заданию ИЯФ СО РАН, в стойке находится 8 источников [2]. Перечислим параметры, за которыми должен следить модуль безопасности:

1. Состояние заземлителей – подняты или опущены;
2. Двери стойки – открыты или закрыты;
3. Датчики температуры в стойке;

4. Внешние и внутренние разрешения/запросы на работу – разрешение на зарядку ёмкостей для каждого источника.

Эти параметры поступают на входные каналы модуля блокировок и мониторинга, и после их обработки модуль отправляет сигналы на выходные каналы:

1. Сигнал на силовые реле, включающие/выключающие питание стойки;
2. Сигнал заземлителям источников – поднять или опустить;
3. Ответ на внешний запрос о начале работы источника;
4. Индикация на стойке.

Отметим отдельно, что ИИП работают от служебного источника напряжения 48 В 3 кВт. Параметры, которые выдаёт данный преобразователь, отображаются на мониторе, расположенном в непосредственной близости от него. Датчики температуры и световая индикация также расположены непосредственно на стойке с источниками. Однако есть необходимость следить за этими параметрами удалённо, например, из пультной ускорителя, т.е. требуется разработать внешний интерфейс для модуля мониторинга, что и было сделано в данной работе. Все эти данные пользователь получает от сервера модуля мониторинга по статическому IP-адресу стойки с источниками.

Плату модуля мониторинга, внешний вид которой представлен на рис. 1 условно можно разделить на две части: все сигналы и блокировки обрабатывает ПЛИС семейства MAX V, а высокоуровневые задачи обработки информации и передачи её пользователю принимает на себя STM-контроллер.

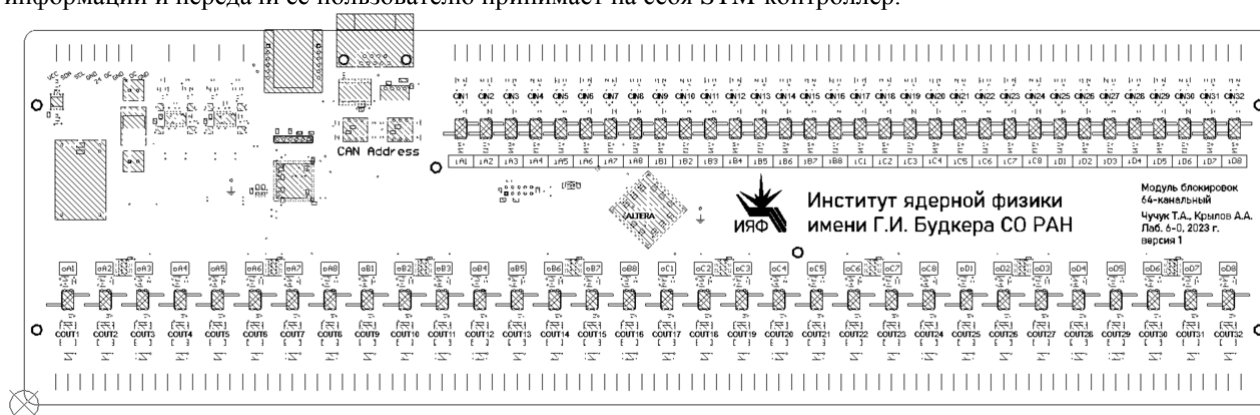


рис. 1 Плата модуля блокировок и мониторинга для ИИП

Список публикаций:

[1] Fatkin G. LIA-20 control system project // 16th ICALEPCS. 2017. P. 1485-1488.
[2] Крылов А.А. ГИД-160 — импульсный генератор питания магнитных элементов ускорителей // Физика элементарных частиц и атомного ядра. 2022. №5. С. 457-463.

Компактный волноводный полосно-пропускающий фильтр на толстых металлических диафрагмах.

Шевченко Андрей Константинович
Южный федеральный университет
Крутиев. Сергей Владимирович, к.ф.-м.н.
ash@sfnu.ru

Волноводные СВЧ фильтры представляют собой отдельный класс перспективных функциональных устройств, которые динамически развивается в настоящее время. Микроволновые фильтры имеют широкий спектр применения в различных радиотехнических устройствах: приемные модули, передающие устройства, частота и устройства генерации сигналов, устройства развязки. Развитие систем связи требует увеличение

частоты каналов. Таким образом, тренд миниатюризации в настоящее время является актуальным в системах связи [1–5].

В данной работе приводится электродинамический анализ и синтез компактного полосно-пропускающего фильтра. Уменьшение массо-габаритных размеров фильтра проводится путем введения в структуру фильтра емкостных диафрагм. На рис. 1 показан внешний вид трехмерного фильтра, а на рис. 2 показана амплитудно-частотная характеристика фильтра и компактного фильтра. Толщина резонансной металлической диафрагмы составляет $w=1,5$ мм. Продольный размер фильтра уменьшился в 3 раза при сохранении АЧХ.

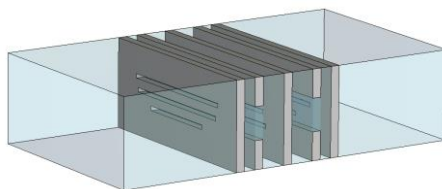


рис. 1 – Модель фильтра третьего порядка с тремя прямоугольными щелями

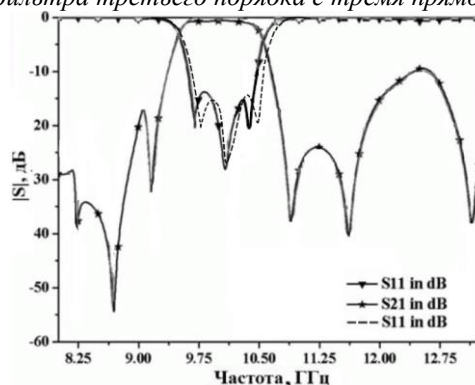


рис. 2 – АЧХ фильтра третьего порядка с тремя прямоугольными щелями

Список публикаций:

- [1] X. Chen, K. Wu, and Zh. Li, "Dual-Band and Triple-Band Substrate Integrated Waveguide Filters With Chebyshev and Quasi-Elliptic Responses" *IEEE Trans. Microw. Theory*, VOL. 55, NO. 12, PP. 2569-2578, 2007.
- [2] Sergey V. Krutiev; Daria V. Lonkina; Svetlana S. Efremova; Andrey S. Ipatiev *Electrodynamical Analysis and Synthesis of Band-pass Filters on a Rectangular Waveguide with Complex Thin Resonant Diaphragms in the Form of a Double-Shaped C-aperture // 2021 Radiation and Scattering of Electromagnetic Waves (RSEMW)*, 28 June 2021 - 02 July 2021, DOI: 10.1109/RSEMW52378.2021.9494046
- [3] S. V. Krutiev; D. V. Lonkina; P. V. Makhno; A. B. Kleshchenkov; V. V. Makhno *Design and Fabrication of Compact Waveguide Filter with Complementary Split-ring Resonators (CSRR) // 2022 Photonics & Electromagnetics Research Symposium (PIERS)*, 25-29 April 2022, DOI: 10.1109/PIERS55526.2022.9792588
- [4] Zemlyakov, V.V., Zargano, G.F., Krutiev, S.V., Tyaglov, M.Y. *Electrodynamical Analysis and Synthesis of an Elliptic Filter Based on Complex Resonant Irises in a Rectangular Waveguide // Radiophysics and Quantum Electronics*, 2019, 61(12), pp. 915–923, DOI: <https://doi.org/10.1007/s11141-019-09947-0>
- [5] Viacheslav Zemlyakov, Sergey Krutiev, Mikhail Tyaglov, Valery Shevchenko *A design of waveguide elliptic filter based on resonant diaphragms with a complex aperture // International Journal of Circuit Theory and Applications*, 2019, 47(1), pp. 55–64, DOI: <https://doi.org/10.1002/cta.2566>

18 - Приборы и методы экспериментальной физики. Информационные технологии в физических исследованиях

Абдурахимов Муслимбек Абдулбоки-угли, 4 курс

Архангельск, Северный Арктический федеральный университет им. М.В. Ломоносова, высшая школа естественных наук и технологий

Создание контроля неисправности систем кондиционирования и поддержания температуры и влажности центров обработки данных.

Алексей Юрьевич Лагунов, к.п.н.

e-mail: abdurahimov.m@edu.narfu.ru стр. 271

Ахняпов Эмиль Шамилович, 4 курс

Уфа, Уфимский университет науки и технологий, физико-технический институт

Исследование одноканальной оптической линии связи со скоростью передачи информации 10 Гбит/с

Лопатюк Алёна Викторовна

e-mail: emilakhnyapov5@gmail.com стр. 272

Бережной Данила Александрович, 4 курс

Владивосток, Дальневосточный федеральный университет, Институт математики и компьютерных технологий

Разработка аппаратной части сканера для поиска закладных устройств

Полянский Дмитрий Александрович, к.ф.-м.н.

e-mail: [bereznoi.da@students.dvfu.ru](mailto:berezhnoi.da@students.dvfu.ru) стр. 274

Валитов Денис Русланович, 1 курс

Стерлитамак, Стерлитамакский филиал Уфимского университета науки и технологий, математики и информационных технологий

Об алгоритме поиска траектории трассы катодно-поляризуемого магистрального трубопровода на основе БПЛА-мониторинга распределения магнитного поля

Викторов Сергей Владимирович, к.ф.-м.н.

e-mail: ssilverufa@yandex.ru стр. 275

Евтихов Владислав Викторович, 4 курс

Владивосток, Дальневосточный федеральный университет, институт математики и компьютерных технологий

Создание генератора пространственного зашумления для защиты информации от утечки по каналу ПЭМИН при использовании HDMI

Полянский Дмитрий Александрович, к.ф.-м.н.

e-mail: molodegka_rulit@mail.ru стр. 275

Ефимова Милана Владимировна, 4 курс

Уфа, Уфимский университет науки и технологий, ООО РН БашНИПИнефть, физико-технический институт

Разработка алгоритмов поиска и создания внеплановых гидродинамических исследований методами гидропрослушивания и анализа добычи и давления

Питюк Юлия Айратовна, к.ф.-м.н.

e-mail: efimova.milana01@gmail.com стр. 276

Лопатюк Алёна Викторовна, ст. преподаватель

Уфа, Уфимский университет науки и технологий, физико-технический институт

Исследование одноканальной оптической линии связи с внешней модуляцией сигнала

Лопатюк Алёна Викторовна

e-mail: alyona-lopatyuk@yandex.ru стр. 278

Полянский Дмитрий Александрович, доцент

Владивосток, Дальневосточный федеральный университет, ИНТиПМ

Оценка возможности несанкционированной установки систем слежения и прослушивающих устройств в гибридных автомобилях

e-mail: polyanskiy.da@dvfu.ru стр. 281

Полянский Дмитрий Александрович, доцент
Владивосток, Дальневосточный федеральный университет, ИНТиПМ
Оценка возможности утечки информации, обрабатываемой на моноблоках, по каналу ПЭМИН
e-mail: polyanskiy.da@dvfu.ru стр. 280

Свиницкий Михаил Юрьевич, 4 курс
Владивосток, Дальневосточный федеральный университет, Институт математики и компьютерных технологий
Разработка программного обеспечения сканера для поиска закладных устройств
Полянский Дмитрий Александрович, к.ф.-м.н.
e-mail: bandirart@gmail.com стр. 283

Шауро Виталий Павлович
Красноярск
Обзор эксперимента Google на 53-кубитном процессоре Sycamore
e-mail: Shaurkin@hotmail.com стр. 283

Создание контроля неисправности систем кондиционирования и поддержания температуры и влажности центров обработки данных

Абдурахимов Муслимбек Абдулбоки угли

Северный Арктический федеральный университет им. М. В. Ломоносова

Лагунов Алексей Юрьевич

Abdurahimov.m@edu.narfu.ru

Центры обработки данных (ЦОД) — это критически важные инфраструктуры, в котором размещено оборудование для обработки и хранения данных и которое подключено к высокоскоростным каналам связи. Эти центры потребляют большое количество энергии для работы и обслуживания серверов, вычислительного оборудования и систем охлаждения. Однако кондиционеры склонны к сбоям и могут повлиять на производительность, потребление энергии и контроль влажности. В данном исследовании мы предлагаем разработку автоматической системы оповещения, которая выявляет отказы кондиционеров в центрах обработки данных и предупреждает пользователей.

Сегодня, по мере роста компаний, географически распределенные местоположения, такие как филиалы и новые подразделения, создают новые потребности в обширных ИТ-инфраструктурах из-за значительного увеличения объема информации, увеличения количества используемых бизнес-приложений, а также удаленного хранения и обработки данных [1].

Когда возникает необходимость консолидации обработки данных и централизации ИТ-инфраструктуры и информационных систем, компаниям приходится задумываться о том, строить ли собственный центр обработки данных [2] или арендовать (передать на аутсорсинг) коммерческий центр обработки данных. Таким образом, реальная потребность в центре обработки данных возникает тогда, когда становятся важными высокая эффективность использования ресурсов ИТ-инфраструктуры, высокая доступность, масштабируемость, непрерывность, управляемость и предсказуемость прикладных услуг. Именно тогда стабильность некоммерческого предприятия или бизнеса начинает зависеть от его ИТ-инфраструктуры.

Таким образом, аутсорсинг становится очень важным предприятием для современного бизнеса и приносит очень высокий прибыль владельцу. Наш проект тоже проведут такие приложения и расширить основных станции для реализации проекта.

Структурную схему ЦОД можно представить следующим образом (рис. 1).

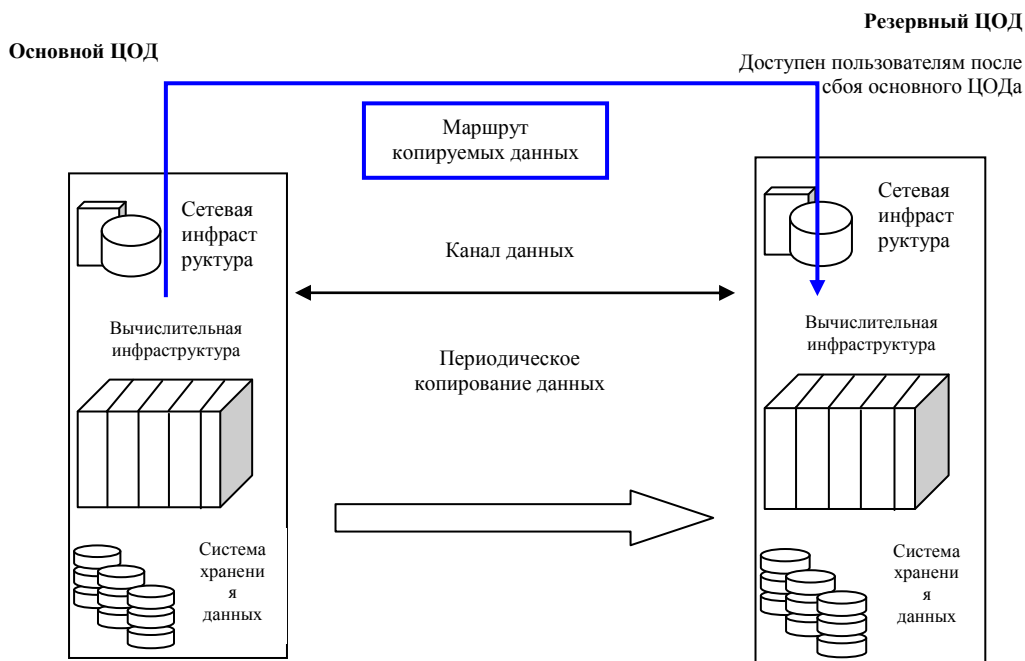


рис. 3 – Структурная схема центра обработки данных

Структура ЦОД включает в себя три уровня: модуль ядра, модуль доступа к внешним сетям и модуль управления сетевой инфраструктурой. Среди основных функций центра обработки данных как комплексной отказоустойчивой централизованной системы находятся хранение, обработка и распространение информации.

контроля параметров линии связи: устройство для отображения формы сигналов, анализатор глаз-диаграммы, анализатор спектра сигнала и тестер битовых ошибок (BER).

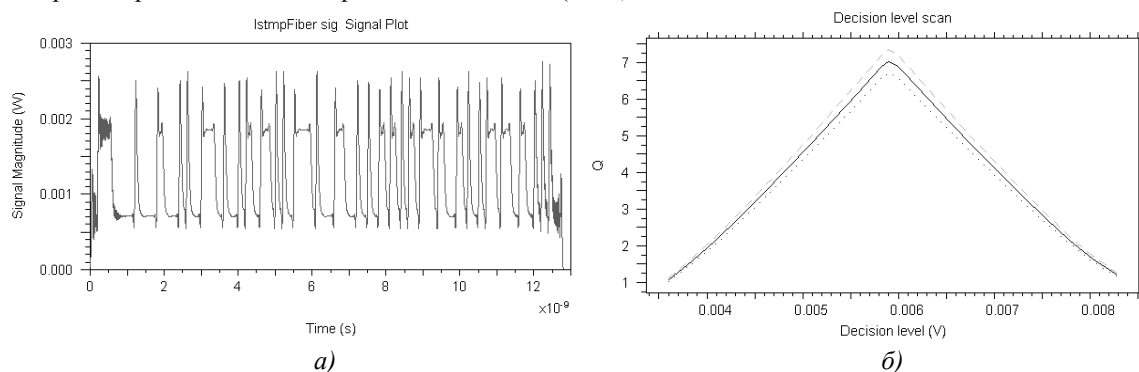


рис.2. а) Вид сигнала после оптического волокна и б) зависимость Q-фактора от уровня принятия решения.

Максимальное значение Q-фактора наблюдается при уровне принятия решения, равным 0,0059 В. Q-фактор – параметр, отражающий качество сигнала цифровой системы передачи. (рис. 2. б)

Построим графики зависимостей битовой ошибки BER от различных параметров системы:

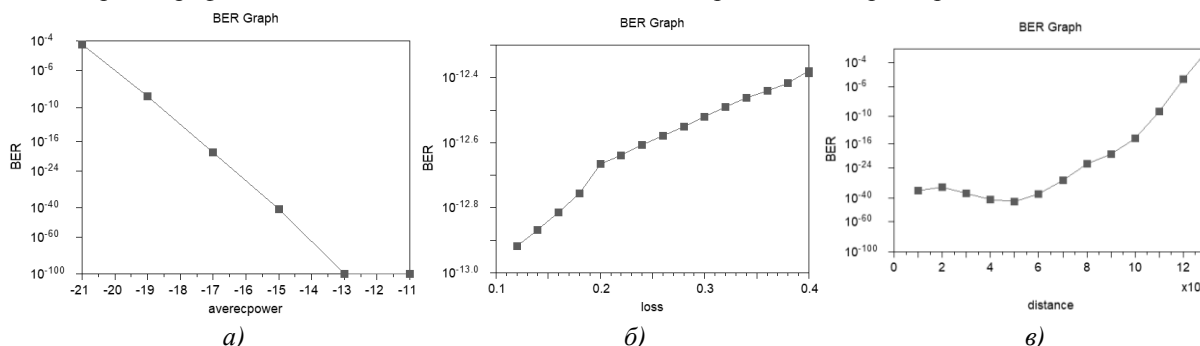


рис.3. Графики зависимостей битовой ошибки BER от а) средней мощности нормализатора мощности, б) затухания сигнала в оптическом волокне и в) длины проектируемой линии связи.

Битовые ошибки являются одними из основных источников ухудшения качества передаваемой информации. Его значения имеют следующую характеристику [2]:

Номинальное для одноканальной линии - $BER < 10^{-9}$;

- нормальное - $BER < 10^{-6}$;
- пониженное – $10^{-6} < BER < 10^{-3}$ (предаварийное состояние);
- неприемлемое - $BER > 10^{-3}$ (аварийное состояние).

Оптимальная работа линии осуществляется при значении средней мощности не ниже -18,5. (рис. 3. а)

Одним из основных параметров, влияющих на уровень битовых ошибок BER, является затухание сигнала в оптическом волокне. Видим, что уровень битовых ошибок увеличивается практически линейно с ростом затухания в оптическом волокне. (рис. 3. б)

Немаловажную роль в битовых ошибках играет и длина линии связи. Поэтому важнейшей задачей проектирования линий связи является расчёт длин регенерационных участков. Исходя из графика видно, что длина регенерационного участка составляет около 115 км. Наименьшее значение уровня битовой ошибки достигается при длине линии в 50 км. (рис. 3. в)

Список публикаций:

[1] Ахняпов Э.Ш., Мухамедов Д.И., Лопатюк А.В. // Разработка волоконной оптической системы передачи информации на базе DSF волокна. Фундаментальная математика и ее приложения в естествознании: спутник Международной научной конференции «Уфимская осенняя математическая школа-2022»: тезисы докладов XIII Международной школы-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых, посвященной 50-летию образования математического и физического факультетов БашГУ (г. Уфа, 19 – 22 октя 2022 г.) / Л.А. Габдрахманова. – Уфа: РИЦ БашГУ, 2022. – С.57-58.
 [2] Ахняпов Э.Ш., Куликовский Н.А., Лопатюк А.В. // Исследование цифрового кольца, обеспечивающего межстанционную связь на ГТС. Теоретические и экспериментальные исследования нелинейных процессов в конденсированных средах: материалы VIII Межрегиональной школы-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых (г. Уфа, 22 – 23 апреля 2022 г.) с.185-186.

Разработка аппаратной части сканера для поиска закладных устройств

Бережной Данила Александрович

Дальневосточный федеральный университет

Полянский Дмитрий Александрович, к.ф.-м.н.

[bereznoi.da@students.dvfu.ru](mailto:berezhnoi.da@students.dvfu.ru)

Состояние защищенности в организациях обеспечивается множеством средств и методов, которые затрагивают различные области информационной безопасности и одной из важнейших областей является защита технических каналов утечки информации. Актуальность задач, решаемых в данной области, обуславливается большим количеством рисков, связанных с реализацией угроз информационной безопасности с применением устройств негласного съема информации, которые не требуют от злоумышленника большого уровня компетенций, а также вложений на создание устройства.

Одной из таких задач является защита организации от кражи злоумышленниками данных с помощью радиозакладных устройств. При решении данной задачи возникает необходимость в приборах контроля радиочастотного диапазона, а также подходящем наборе антенн, которые позволят вести контроль нужного диапазона частот. Одним из наиболее эффективных решений данной задачи являются промышленные поисковые комплексы, однако ввиду большой стоимости они не доступны большинству организаций малого и среднего бизнеса. Исходя из вышесказанного, можно утверждать, что наиболее рациональным решением задачи борьбы с радиозакладными устройствами является использование недорогих радиоприемников, которые в совокупности с общедоступным программным обеспечением и правильным набором антенн позволяют выявлять радиозакладные устройства.

Целью данной работы является разработка аппаратной части сканера для поиска радиозакладных устройств. В ходе выполнения данной работы необходимо определить диапазон частот, в котором будут анализироваться сигналы. Также необходимо определить аппаратную базу, на основе которой будет функционировать сканер закладных устройств.

Главной особенностью радиозакладных устройств является их многообразие, являющееся следствием существующих запретов на свободный их оборот, а также самодельного производства злоумышленниками. Ввиду вышесказанного приходится констатировать тот факт, что во многих классификациях значения показателей классификации могут различаться. Например, радиозакладные устройства способны работать как на низких, так и сверхвысоких частотах [1]. Поэтому для решения задачи защиты от радиозакладных устройств логичным решением было бы учитывать технические возможности той аппаратной базы, использование которой было бы рациональным с точки зрения финансовых возможностей организации.

В качестве основы аппаратной базы выступает программно-определяемая радиосистема (SDR приемник), выполненная в виде печатной платы с USB коннектором. Такой тип приемника, позволяет изменять различные настройки радиочастотных параметров. Данный вид приемников имеется в разных ценовых сегментах, но даже многие низкобюджетные варианты плат способны работать в диапазоне 20-1700 МГц, что позволяет закрыть ощутимый диапазон частот вплоть до диапазонов работы систем GPS и ГЛОНАСС. USB коннектор в свою очередь позволяет использовать приемник вместе с ноутбуком. Благодаря этому мы также экономим на приборе, так как модели со встроенным дисплеем стоят дороже, к тому же у нас появляется возможность запускать на ноутбуке программное обеспечение с открытым исходным кодом, что позволит работать с приемником более эффективно.

Так же необходимо подобрать оптимальную для работы устройства антенну. В поисковых устройствах антенное устройство используется в первую очередь для приема сигнала. Ввиду того, что съем информации злоумышленниками с радиозакладных устройств происходит за счет излучаемого устройствами сигнала, этот сигнал и является главным демаскирующим фактором. Радиозакладные могут работать на разной частоте поэтому главным критерием выбора антенны является ее полоса частот. Исходя из этого выбор пал на логопериодическую антенну. Она является распространенной, не дорогой и ее не сложно рассчитать и сделать самостоятельно при необходимости. Данный тип антенн обладает широким диапазоном рабочих частот, за счет использования длинных и коротких вибраторов, увеличение количества которых, увеличивает ее полосу частот.

В статье представлена концепция сканера для поиска закладных устройств. Определены основные составные элементы данного поискового устройства. Будут проведены эксперименты по обнаружению имитаторов радиозакладных устройств. Для этого будет использоваться SDR приемник, ноутбук и программное обеспечение, с помощью которых будет происходить считывание, обработка и анализ данных радиочастотного контроля.

Список публикаций:

[1] *Классификация электронных устройств перехвата информации [Текст]: / Хорев А.А. – М.: Спецтехника и связь. 2009. - №1. - С.46 – 50.*

Об алгоритме поиска траектории трассы катодно-поляризуемого магистрального трубопровода на основе БПЛА-мониторинга распределения магнитного поля

Валитов Денис Русланович

Сафаргалиева Раина Ринатовна

Стерлитамакский филиал Уфимского университета науки и технологий

Викторов Сергей Владимирович, к.ф.-м.н.

ssilverufa@yandex.ru

Математические модели распределения магнитных полей, регистрируемых в воздушном пространстве над поверхностью грунта, в котором размещен катодно-поляризуемый магистральный трубопровод [1, 2], положены в основу решения актуальной в настоящее время проблемы износа магистральных трубопроводов.

Интерпретация информации, полученной при регистрации магнитной составляющей поля, может быть использована для неразрушающего контроля за состоянием трубопровода.

Для решения вопроса эффективного поиска дефектных участков изоляции магистральных трубопроводов предлагается использовать программно-аппаратный комплекс [3], где в качестве измерительной аппаратуры выступает магнитный градиентометр, а в качестве ПО – программное средство, реализующее математические модели электрических и магнитных полей катодной защиты магистральных трубопроводов в изотропных кусочно-однородных и анизотропных средах [1, 2].

Использование в качестве носителя измерительной системы беспилотного летательного аппарата позволит существенно снизить затраты на обслуживание трассы. В этом случае возникает ряд дополнительных задач, связанных с управлением БПЛА в автоматизированном режиме определения траектории полета (режиме трассометрии).

На основе данной модели построен алгоритм, по которому может быть произведен облет беспилотного летательного аппарата (БПЛА) с закрепленным на нем градиентометром для измерения магнитного поля трубопровода в режиме трассометрии.

На основе предложенного алгоритма может быть построено полетное задание на возврат БПЛА к оператору по найденным точкам оси трубы. Пролетая максимально точно над трассой возможно провести детальные измерения, интерпретация которых позволит определять проблемные участки изоляции без физического нарушения трассы трубопровода.

Список публикаций:

[1] Кризский В.Н., Александров П.Н., Ковальский А.А., Викторов С.В. Моделирование электромагнитных полей систем катодной защиты трубопроводов в горизонтально-слоистых средах // *Наука и технологии трубопроводного транспорта нефти и нефтепродуктов.* – 2019. – Т. 5. № 9 – С. 558 – 567

[2] Кризский В.Н., Александров П.Н., Ковальский А.А., Викторов С.В. Математическое моделирование электрических полей катодной защиты магистральных трубопроводов в анизотропных средах // *Наука и технологии трубопроводного транспорта нефти и нефтепродуктов.* – 2020. – Т. 1 №10 – С. 52 – 63.

[3] Кризский В.Н., Викторов С.В., Лунтовская Я.А. Математическое моделирование переходного сопротивления изоляции магистрального трубопровода по данным измерений модуля вектора магнитной индукции // *Математическое моделирование.* – 2022. – Т. 34 №9 – С. 107 – 122.

Создание генератора пространственного зашумления для защиты информации от утечки по каналу ПЭМИН при использовании HDMI

Евтихов Владислав Викторович

Дальневосточный федеральный университет

Полянский Дмитрий Александрович, к.ф.-м.н.

molodegka_rulit@mail.ru

В области технической защиты особое влияние имеет такой технический канал утечки информации как побочные электромагнитные излучения и наводки (ПЭМИН). Актуальность данной утечки обуславливается тем, что с помощью данного канала, в большинстве случаев, похищается информация, относящаяся к государственной тайне, так как все устройства, обрабатывающие такую информацию, изолированы от сети, поэтому кибератаки малоэффективны. Оценочно, по каналу ПЭМИН может быть похищено всего 1-2 процента данных, хранимых и обрабатываемых на персональных компьютерах и других технических средствах передачи информации (ТСПИ). С одной стороны, этот канал менее опасен, чем, например, акустический, по которому может произойти утечка до 100% речевой информации, циркулирующей в помещении. Но с другой стороны,

стоит помнить, что специфика канала ПЭМИН такова, что те самые два процента информации, уязвимые для технических средств перехвата — это данные, вводимые с клавиатуры компьютера или отображаемые на дисплее, то есть довольно значительная часть сведений, подлежащих защите, может оказаться доступна для чужих глаз.

Целью данной работы является создание генератора пространственного зашумления (ГПЗ) для защиты информации от утечек по каналу ПЭМИН при использовании такого видеоинтерфейса, как HDMI. В ходе работы необходимо определить частоты, на которых работает данный видеоинтерфейс при использовании с различными разрешениями мониторов. Был выбран именно данный интерфейс по нескольким причинам: большая популярность в использовании, высокая интенсивность излучения и дальность распространения побочных электромагнитных излучений.

Данная цель будет достигнута за счет помехи типа «белого шума» или «синфазные помехи». Системы пространственного зашумления, использующие помехи данного вида, применяются для защиты персональных компьютеров (ПК). В качестве сигнала помех в данных системах используются импульсы случайной амплитуды, которые синхронизированы по форме и времени существования с импульсами информационного сигнала. Таким образом, сигнал помех по своему спектральному составу является идентичным спектру побочный электромагнитных излучений ПЭВМ. Иными словами, система пространственного зашумления вырабатывает «имитационную помеху», которая соответствует по спектральному составу скрываемому сигналу.

Стоит учитывать, что генератор пространственного зашумления должен покрывать всю выбранную нами контролируемую зону (КЗ) – зона, в которой возможен перехват информации, обрабатываемой ПК, с помощью различных разведывательных приемников и дальнейшая расшифровка этой информации. Также в пределах контролируемой зоны отношение «информационный сигнал/помеха» не должно превышать допустимое нормированное значение.

Для создания генератора шума будет использоваться передающая антенна, так как ГПЗ работает на передаче. Вид нужной антенны будет определен после определения частот, на которых работает видеоинтерфейс HDMI. Что известно на данный момент, что нам не потребуется широкополосная антенна, так как нам достаточно работы на узкой полосе частот, но в разных частотных диапазонах.

Подводя итоги к вышесказанному, в результате будет создан самопальный генератор пространственного зашумления для частот работы HDMI. Сначала будет подобрана подходящая схема для создания ГПЗ, потом подобрана антенна, сигнал будет проанализирован на осциллографе и на анализаторе спектра. После всего перечисленного будет произведена попытка съема побочного электромагнитного излучения видеоинтерфейса для проверки работоспособности нашей системы зашумления.

Разработка алгоритмов поиска и создания внеплановых гидродинамических исследований методами гидропрослушивания и анализа добычи и давления

Ефимова Милана Владимировна^{1,2}

Фахреева Регина Рафисовна¹

¹ООО «РН-БашНИПИнефть», ²Уфимский университет науки и технологий

Путюк Юлия Айратовна, к.ф.-м.н.

MV_Efimova2@BNIPL.rosneft.ru

В настоящее время для эффективного управления разработкой месторождений необходимо повышать информативность о гидродинамических параметрах пласта. Этого можно добиться путем увеличения количества и качества проводимых гидродинамических исследований скважин (ГДИС). Однако проведение традиционных плановых ГДИС является трудозатратным и дорогостоящим процессом, который влечет за собой значительные потери нефти. В связи с увеличением количества и качества динамических данных эксплуатации скважин со скважинной телеметрии становится возможным использование внеплановых событий на скважинах для проведения ГДИС [1,2]. Таким образом, автоматизация проведения внеплановых исследований является актуальной задачей. Целью работы является применение разработанных подходов для поиска и создания внеплановых ГДИС методами гидропрослушивания (ГП) и анализа добычи/давления (АДД) на месторождении республики Башкортостан.

Метод гидропрослушивания позволяет оценивать гидродинамическую связь между скважинами по пласту, выявлять непроницаемые границы и определять ФЕС пласта [3]. Основной принцип ГП заключается в следующем – одна из скважин выступает в роли возмущающей, остальные – реагирующие. На возмущающей

скважине происходит смена режима работы, т.е. в пласте создается импульс давления, который распространяется от возмущающей скважины и регистрируется на реагирующей скважине.

Анализ добычи и давления позволяет получить те же самые параметры пласта и заканчивания скважины, что и при проведении традиционных методов ГДИС (кривая восстановления давления/кривая восстановления уровня), но без потерь в добыче нефти [4]. Суть метода заключается в анализе динамических данных эксплуатации скважины и в настройке модели системы скважина-пласт-область дренирования с известным значением начального пластового давления.

Концепция проведения внеплановых исследований методами гидропрослушивания (ГП) и анализа добычи/давления (АДД) базируется на трех этапах. На первом этапе (рис.1) происходит поиск скважин-кандидатов для проведения анализа с помощью идентификации событий на скважинах. На втором этапе (рис.2) происходит оценка целесообразности проведения анализа по разработанным алгоритмам: однозначный ответ, последовательность проверки условий выхода, критичность мероприятий. Если хотя бы по одному из алгоритмов вышла оценка «Нецелесообразно», то создание и проведение исследования является нецелесообразным. По результатам второго этапа на скважинах, потенциальных к проведению исследования, специалист ГДИС проводит интерпретацию в ПК «РН-ВЕГА» [5] и анализ накопленных динамических данных на найденном информативном интервале (рис.3).

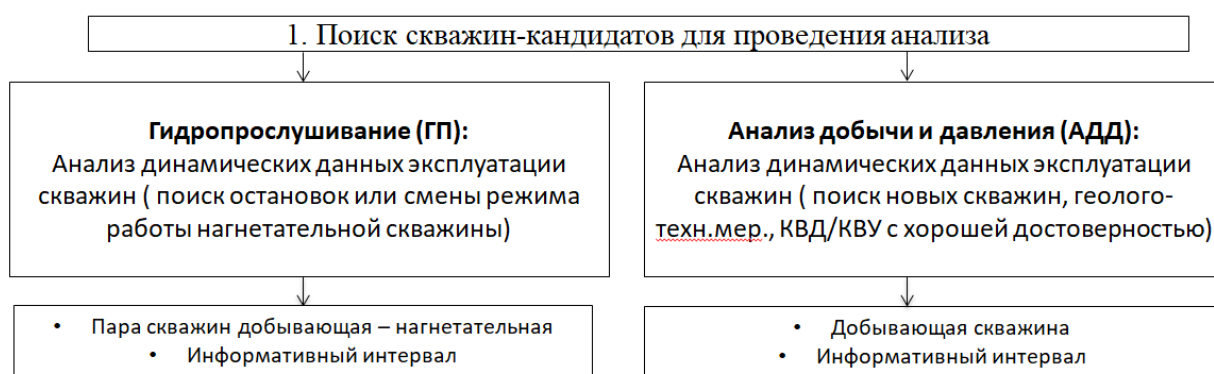


рис.1. Первый этап проведения внеплановых исследований ГП и АДД



рис.2. Второй этап проведения внеплановых исследований ГП и АДД

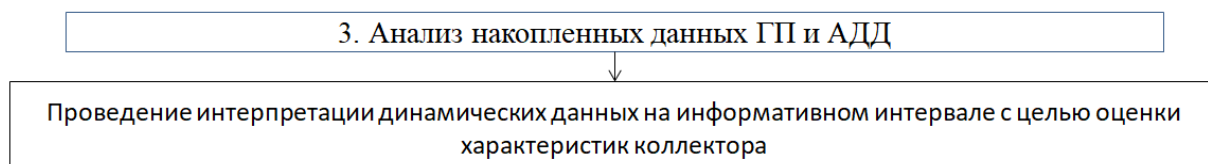


рис.3. Третий этап проведения внеплановых исследований ГП и АДД

Разработанные алгоритмы поиска и создания внеплановых ГП и АДД были протестированы на исторических данных на скважинах месторождения Республики Башкортостан. В результате тестирования найдены кандидаты на проведение исследований. В табл.1 представлены результаты работы модуля по поиску кандидатов методами АДД и ГП для тестирования расчетного сервиса поиска и сопровождения ГДИС.

Табл.1. Результаты тестирования алгоритмов поиска и создания ГДИС методами АДД и ГП

Вид ГДИС	Проанализировано проведение ГДИС	Создание ГДИС целесообразно	Часто встречающиеся причины при создании ГДИС	Проведение ГДИС целесообразно	Часто встречающиеся причины при проведении ГДИС
АДД	177	26	Достаточная точность ТМС, Риски интерференции, Отсутствие данных РVT	0	Разрывы данных давления/дебита по времени, Недостаточное кол-во точек давления
ГП	214	52	Отсутствие данных по давлению, Риски интерференции	3	Отсутствие данных по давлению/дебиту, Разрывы данных давления/дебита по времени, Недостаточное кол-во точек дебита

Можно заметить, что наиболее частые нецелесообразные причины при накоплении данных для проведения ГДИС методом ГП и АДД связаны с кондиционностью данных давления и дебита. Достоверность и информативность результатов интерпретации исследований напрямую зависят от полноты и качества исходных данных. Поэтому рекомендуется оснащение скважин датчиками телеметрии, позволяющими замерять давление не менее 1 раза в 5 минут, а расходы замерять как минимум 1 раз в двое суток.

Таким образом, разработанный подход по поиску и созданию внеплановых ГДИС методами ГП и АДД был протестирован и позволил выявить скважины с некондиционными динамическими данными.

Список публикаций:

- [1] Питюк Ю.А., Акмурзина Г.Р., Давлетбаев А.Я., Азарова Т.П., Фаргер Д.В., Кривуляк А.С. Зылева С.А. Разработка инструмента для проведения гидродинамических исследований скважин в режиме реального времени // Российская нефтегазовая техническая конференция SPE. – SPE-201898-RU. – 2020.
- [2] Фахреева Р.Р., Питюк Ю.А. и др. Автоматизация оценки целесообразности, подготовки и проведения ГДИС в режиме реального времени по данным телеметрии. // Инженерная практика. – № 10/2022. – 2022.
- [3] Деева Т.А. Гидродинамические исследования скважин: анализ и интерпретация данных. – Томск: центр профессиональной переподготовки специалистов нефтегазового дела ТПУ, 2010. – 240 с
- [4] Кременецкий М.И., Ипатов А.И. Долговременный мониторинг промысловых параметров, как знаковое направление развития современных ГДИС // Инженерная практика. – 2012. – № 9. – С. 4–8.
- [5] <https://rn.digital/rnvega/>

Исследование одноканальной оптической линии связи с внешней модуляцией сигнала

Лопатюк Алена Викторовна

Полканова Алина Михайловна, Сидорова Олеся Владиславовна

Уфимский университет науки и технологий

Лопатюк Алена Викторовна.

alyona-lopatyuk@yandex.ru

Одноканальная линия связи используется во многих оптических системах, поэтому рассмотрение данной темы остается актуальной на сегодняшний день. В данной работе мы собрали одноканальную оптическую линию связи с внешней модуляцией сигнала, которая показана на рис.1 (а). Она состоит из следующих элементов: PRBS генератор, генератор сигнала, лазер с синхронизацией мод, электрооптический модулятор, волокно, оптический усилитель, оптический фильтр, оптический нормализатор мощности, фотоприемник, BER-тестер [1].

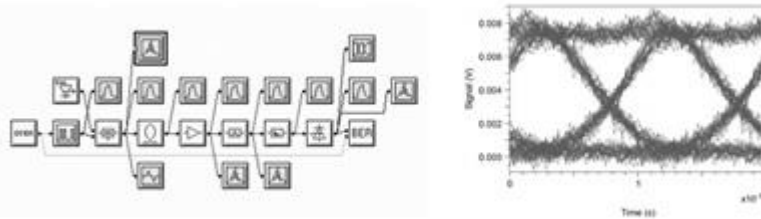


рис.4 а) Одноканальная оптическая линия связи; б) Глаз-диаграмма

Для визуального контроля степени искажения, зашумленности сигнала, текущего контроля состояния тракта передачи и приёма цифровых сигналов используется глаз – диаграмма, показанная на рис.1 (б).

На полученной диаграмме мы видим, что 7,5 мВ – это уровень принятия решения «1», а 0,5 мВ – уровень принятия решения «0», тогда раскрытие глаза составляет 7 мВ.

Для измерения коэффициента ошибок в оптическом канале используется метод на основе оценки Q-фактора, который представляет собой отношение (1):

$$Q = \frac{|\mu_1 - \mu_0|}{\sigma_1 + \sigma_0} = \frac{7,5 - 0,45}{0,5 + 0,5} \approx 7,05 \quad (1)$$

Отношение сигнал/шум (2), (3) позволяет оценить мешающее воздействие помех на сигнал. Чем больше это значение, тем меньше шум влияет на полезный сигнал при его передаче по каналу связи и ведет к хорошему распознаванию сигнала приемником.

$$\frac{S_1}{N_1} = \frac{7,5 \text{ мВ}}{0,5 \text{ мВ}} = 15 \quad (2)$$

$$\frac{S_0}{N_0} = \frac{0,45 \text{ мВ}}{0,5 \text{ мВ}} = 0,9 \quad (3)$$

Качество цифрового тракта по критерию ошибок считается нормальным, если $BER < 10^{-6}$.

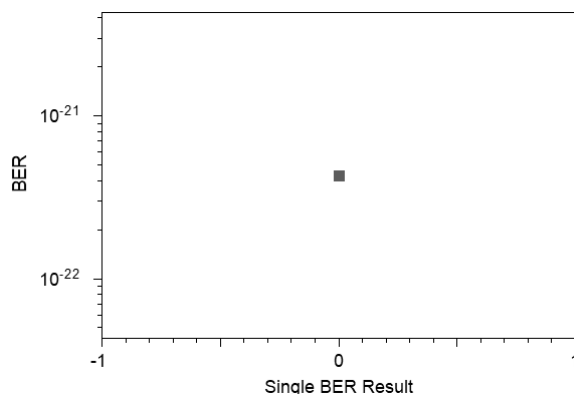


рис.2 Результаты BER-тестера

Из рисунка видно, что значение битовой ошибки 10^{-21} хорошее, линия передачи информации работает в нормальном режиме.

Исследуя работу оптической линии при изменении мощности сигнала лазера от 0.0005 до 0.002 с шагом 0.0005, получили следующие зависимости при разной длине оптической линии [2].

Зависимости получились практически одинаковыми, так как через каждые 40 км устанавливается оптический усилитель, который восстанавливает уровень сигнала. На графиках видно, что битовая ошибка BER увеличивается с ростом расстояния рис.3а), увеличение мощности сигнала лазера приводит к уменьшению битовой ошибки рис.3б), длина линии связи была взята 120 км, поэтому качество связи в волоконно-оптической системе передаче информации низкое.

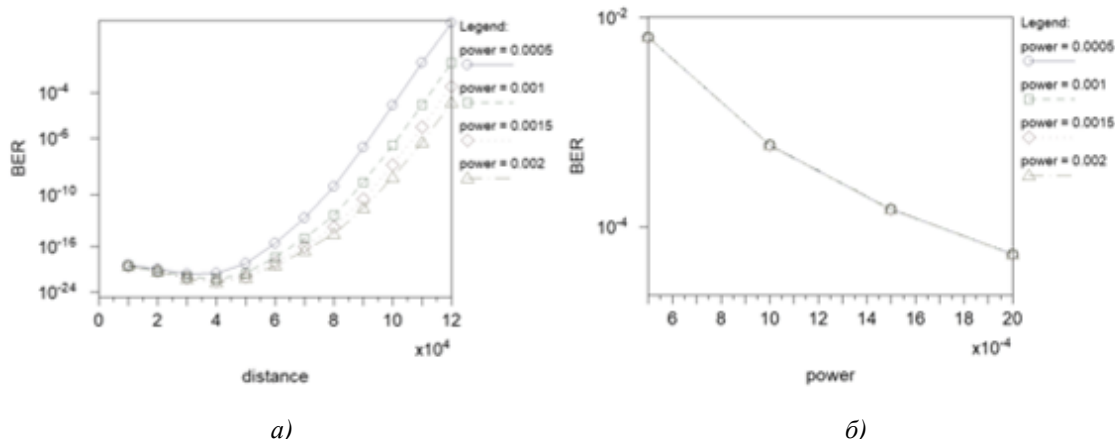


рис.3 Графики зависимости битовой ошибки от длины линии: а) длины оптического волокна, б) мощности излучения лазерного диода

Также меняли усиление оптического усилителя от 0 до 50 с шагом 10, получили зависимости при разной длине оптической линии. Коэффициент усиления равный 30 достаточен для работы линии в номинальном режиме, т.к. наступает насыщение. Таким образом, дальнейшее увеличение коэффициента усиления не влияет на улучшение работы линии передачи информации.

Список публикаций:

[1] Лопатюк А.В. Моделирование и исследование ВОСП-СР, в СИ L диапазонах. Сборник трудов VIII Международной школы-конференции для студентов, аспирантов и молодых ученых «Фундаментальная математика и ее приложения в естествознании». 27 октября -1ноября 2015г. Том 2, Физика Химия Научные статьи, Стр.37-40, г.Уфа, 2015г

[2] Лопатюк А.В., Полканова А.М., Мирзаянова Ч.Д. Исследование отрезка прямого волоконного световода. Тезисы докладов XIII Международной школы-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых, посвященной 50-летию образования математического и физического факультетов БаиГУ., стр.54. г. Уфа, 19 – 22 октября 2022 г

Оценка возможности утечки информации, обрабатываемой на моноблоках по каналу ПЭМИН

Полянский Дмитрий Александрович

Яценко Алексей Андреевич

Дальневосточный федеральный университет

polyanskiy.da@dvfu.ru

В настоящее время большинство офисов мелкого и среднего бизнеса, а так же филиалов крупных компаний расположены либо на первых этажах жилых зданий, либо в бизнес-центрах, следствием чего является ограниченный размер контролируемой зоны, что делает более уязвимой информацию, обрабатываемую на компьютерах в данных офисах. Это усугубляется тем, что сотрудники отделов информационной безопасности сводят всё внимание к борьбе с сетевыми угрозами, упуская из внимания такой технический канал утечки информации как побочные электромагнитные излучения и наводки (ПЭМИН), в англоязычной литературе - «TEMPEST». Один из самых опасных видов ПЭМИН – это излучение кабелей видео-интерфейсов, так как по ним передается не кодируемая информация для отображения на устройствах вывода, и они работают, по сути, как слабые передающие антенны. Перехват по каналу ПЭМИН изображения мониторов не является чем-то новым, он был осуществлён впервые в середине 80-х и известен с тех пор как «перехват Ван Эйка», но опасность его для коммерческой информации на сегодня в РФ всё ещё недооценена. Целью данной работы было исследовать различные видео-интерфейсы на предмет интенсивности их ПЭМИН и оценка возможности перехвата и восстановления изображения.

Широкое распространение моноблоков естественным образом ставит вопрос о интенсивности их ПЭМИН, дальности их распространения, возможности перехвата и дальнейшего восстановления информации В работе исследовались ПЭМИН интерфейсов LVDS и eDP, применяемых в моноблоках для передачи изображения на монитор. В качестве измерительного оборудования применялись Спектральный коррелятор «OSC-5000» и самосборное устройство контроля радиочастотного диапазона в составе SDR–приемника «FOXWEY RTL SDR» (Realtek TL2832u) и логопериодической антенны «RTA–302–20 S».

Первым из исследованных ТСПИ был моноблок «Lenovo ThinkCentre Edge 92z 21.5». Тип видеointерфейса – LVDS. Непосредственно вблизи моноблока фиксируется широкий спектр частот создаваемых им излучений, однако при удалении на расстояние в 2 метра их интенсивность спадает практически до нуля, оставляя различимый набор пиков в диапазоне 430-440 МГц, где и была обнаружена несущая частота 432,5 МГц, на которой было восстановлено изображение, которое было, однако, весьма нечетким. Перейдя к следующему моноблоку, «Lenovo S50–30», с тем же типом видеointерфейса, дальнедействующий диапазон был обнаружен на частотах 630-650 МГц. На частоте 641,5 МГц было перехвачено изображение с хорошим качеством (рис.1).

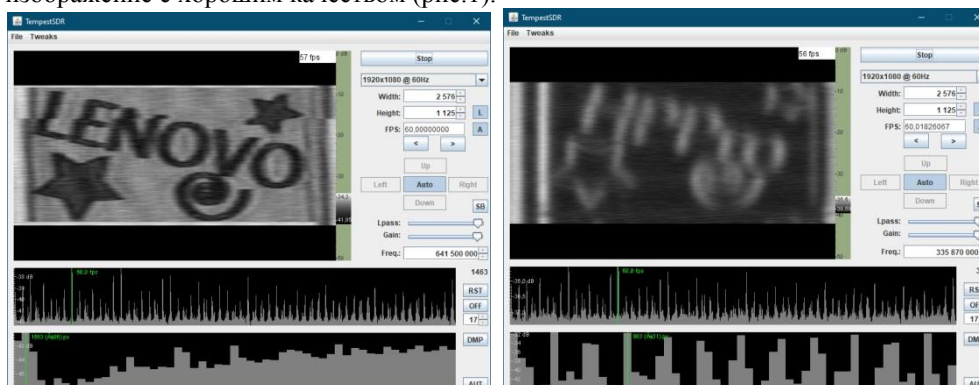


рис.1. Перехваченное изображение с дисплея моноблоков «Lenovo S50–30» и «HP ProOne 400»

Далее был исследован моноблок «HP ProOne 400» с видеointерфейсом LVDS. Дальнедействующая составляющая ПЭМИН была обнаружена в диапазоне 321–342 МГц. Изображение перехвачено на частоте 335,87 МГц, картинка нечеткая, однако надпись и фигуры все еще различимы (рис.1).

Моноблок «Acer Veriton Z4870G» с видеointерфейсом LVDS показал наличие диапазона частот 510–525 МГц. На частоте 519,1 МГц было перехвачено изображение в высоком качестве, аналогичном качеству перехвата для «Lenovo S50–30».

В результате было показано, что, не смотря на малую длину шлейфа видеointерфейса, ПЭМИН моноблоков представляет потенциальную опасность при обработке конфиденциальной информации. Разброс несущих частот разных моделей моноблоков, даже в рамках одного типа видеointерфейса и производителя. Это весьма неочевидный момент. Чисто теоретически основная несущая частота должна зависеть только от типа интерфейса и разрешения экрана. Но в рамках нашего исследования выставлялось одинаковое разрешение, а частота могла отличаться в 2 раза при одном и том же типа интерфейса. Отсюда следует вывод что для защиты информации по каналу ПЭМИН в офисе желательно использовать моноблоки одной модели. Предварительно необходимо протестировать их спектр ПЭМИН, определить основные несущие частоты и дальность их распространения. Работа большого количества однотипных моноблоков создаст эффект пространственного зашумления, что снизит вероятность выделения и перехвата сигнала нужного моноблока. В случае применения генераторов пространственного зашумления это повысит эффективность их противодействия перехвату.

Результаты перехвата изображения, выполненные в одинаковых условиях, наглядно показывают, что качество перехваченного сигнала сильно зависит от модели. Поэтому малому и среднему бизнесу, ограниченному в средствах и возможностях защиты информации, имеет смысл использовать моноблоки типа ThinkCentre Edge 92z 21.5., дающие максимально зашумленную, раздваивающуюся картинку, получаемую по итогам перехвата ПЭМИН, и требующую увеличения финансовых, временных и интеллектуальных усилий на восстановление изображения.

Оценка возможности несанкционированной установки систем слежения и прослушивающих устройств в гибридных автомобилях ПЭМИН

Полянский Дмитрий Александрович

Каменев Кирилл Ярославович

Дальневосточный федеральный университет

polyanskiv.da@dvfu.ru

В настоящее время существует множество различных способов несанкционированного получения информации. Прослушивание разговоров с помощью закладных устройств и отслеживание подвижного объекта с использованием технических средств определения местоположения являются такими способами. Устройства

устанавливаются скрытно и предполагают передачу информации по каналам, которые не влияют на человеческие органы чувств, при этом способны распространяться на большие расстояния. Ввиду доступности и большого выбора средств слежения и прослушки утечка информации является серьезной проблемой как для частных лиц, так и для компаний и государственных структур. Ввиду этого возникла потребность в использовании средств и методы обнаружения устройств негласного съема информации.

Наличие в автомобилях большого объема электроники, которая уменьшает эффективность использования нелинейных локаторов для поиска закладных устройств, наличие большого числа труднодоступных мест для установки, невозможность визуального осмотра, все это усложняет поиск закладных устройств, по сравнению с задачей поиска в помещениях. Применение в автомобилях не только устройств прослушки, но и слежения ещё несколько усложняет работу специалиста по безопасности. Для обеспечения использования гибридной силовой установки в автомобиле установлено дополнительное оборудование с некоторыми особенностями, которыми могут воспользоваться злоумышленники. Автомобили с гибридной силовой установкой появились в широком потреблении, по сравнению с обычными автомобилями, недавно. Немногие люди имеют опыт обслуживания и знания устройства электроники гибридного автомобиля. Это снижает вероятность обнаружения закладного устройства при обследовании оборудования человеком не имеющего опыта обслуживания гибридного автомобиля. В данной работе будут рассмотрены места характерные для автомобиля с гибридной силовой установкой, которые могут быть использованы для установки закладных устройств на примере автомобиля Toyota Prius C.

В результате анализа технических особенностей конструкции автомобиля было выявлено, что наиболее удобным местом установки средств негласного съема информации является разъём вентилятора охлаждения высоковольтной батареи. Помимо возможности быстрого подключения оно имеет 3 питающие линии с номиналом 14,4, 9,2, 4,4 В, что позволяет подключать устройства с разными требованиями по питанию. Но мест установки можно предложить ещё множество, поэтому на примере этой линии было проверено, насколько изменяются параметры электрических цепей при подключении типичных радиозакладки и GPS-трекера. Разница оказалась минимальной (6,47А и 6,5А для закладки и 6,78А и 6,84А для трекера соответственно). Из этого был сделан вывод, что необходимо проводить паспортизацию электрических цепей автомобилей с использованием максимально точного оборудования и при периодических проверках обращать внимание даже на минимальные отклонения.

Установка закладных устройств непосредственно на высоковольтную батарею имеет ряд очевидных деконспиративных признаков. Периодическое сканирование состояния ВВБ может обнаружить факт установки закладного устройства на ВВБ. Довольно распространенным и дешёвым прибором для диагностики неисправностей автомобиля является диагностический адаптер ELM327 на базе микроконтроллера PIC18F25K80. Среди программ для диагностики автомобилей с гибридной силовой установкой, есть несколько, предлагающих проверку состояния батареи, такие как Hybrid Assistant, DR.Prius и MotorData. Наиболее точную информацию о состоянии элементов ВВБ даст приложение Hybrid assistance. При разборе ВВБ для установки устройств необходимо отключить аккумулятор автомобиля и разъединить контакты ВВБ путем извлечения специальной защитной чеки. Отключение электропитания автомобиля повлечет сброс данных с устройств имеющих ОЗУ. Компьютер, который отслеживает расход топлива и, исходя из этого, рассчитывает запас хода, теряет статистику и устанавливает запас хода по умолчанию, который очень завышен. Сбрасывается время. Сбрасываются настройки дополнительных устройств. Это является одним из деконспиративных признаков. Неправильная установка закладного устройства может вызвать возникновение ошибок, которые отображаются на приборной панели автомобиля.

Следующим этапом работы было изучение возможностей выявления подобных устройств в автомобиле с помощью приборов контроля радиочастотного диапазона. Использовался спектральный коррелятор OSC-5000. Сперва было выполнено определение зависимости интенсивности сигнала от расстояния между трекером и спектральным коррелятором, тем самым определены границы ближней зоны. Интенсивность сигналов от GPS-трекера на частотах 1580.87 МГц и 1584.94 МГц оказалась аналогична. Значимое превышение над фоновым уровнем излучения наблюдаются на расстоянии до 20 метров. Для типичного прослушивающего устройства с питанием 9В, нестабилизированного, использующего модуляцию WFM на частоте 71.01 МГц радиус ближней зоны оказался 60 метров. Необходимость использования достаточно мощных устройств вызвана тем, что съём информации необходимо осуществлять в движении, и следует обеспечить достаточную дальность до автомобиля с принимающим устройством, чтобы его присутствие не стало дополнительным деконспиративным признаком.

В результате проделанной работы выработаны методические рекомендации по поиску и противодействию установки закладных устройств в гибридные автомобили.

Разработка программного обеспечения сканера для поиска закладных устройств

Свинцицкий Михаил Юрьевич

Дальневосточный федеральный университет

Полянский Дмитрий Александрович

bandirart@gmail.com

В настоящее время защита от радиозакладных устройств является необходимой мерой для защиты конфиденциальной информации и сохранения коммерческой тайны. Радиоустройства могут использоваться для незаконного прослушивания, подслушивания, шпионажа и других противоправных действий. Проблема особенно актуальна для таких организаций как правительственные учреждения, банки, малые и крупные коммерческие компании.

Наиболее эффективным методом обнаружения радиозакладных устройств является анализ спектра сигналов с помощью анализаторов электромагнитного излучения, благодаря которым есть возможность обнаруживать электромагнитные волны на определенных частотах, определять тип модуляции, оценивать мощность сигнала и быстро сканировать радиочастотный диапазон. Однако, в связи с высокой стоимостью необходимого оборудования, не все компании имеют возможность провести контрразведывательные мероприятия данным способом. Создание недорогих, мобильных и простых в эксплуатации устройств контроля радиочастотного диапазона является важным направлением развития технологии, которое может помочь защитить частные и корпоративные сети от внешних угроз и обеспечить безопасность информации.

Целью данной работы является разработка программного обеспечения сканера радиочастотного спектра сигналов, который позволит заменить дорогостоящие профессиональные устройства для поиска простых радиозакладных устройств и существенно сократить расходы малобюджетных предприятий.

Для того, чтобы обрабатывать сигнал в режиме реального времени, анализатор должен иметь достаточные вычислительные мощности, обладать графическим интерфейсом и устройством вывода изображения для удобной настройки параметров и отображения результатов, поэтому в качестве обрабатывающего оборудования будет использоваться персональный компьютер с предустановленной операционной системой Windows.

В качестве приемника радиосигнала выбрано устройство SDR (Software Defined Radio). В зависимости от конкретной модели устройство может принимать сигнал с частотами от 500 кГц до 1,75 ГГц. Также, среди основных преимуществ SDR можно выделить встроенный аналого-цифровой преобразователь и USB интерфейс, с помощью которого полученный оцифрованный радиосигнал передается напрямую в программное обеспечение анализатора спектра.

Архитектура программного обеспечения включает в себя модули для получения данных от сканера, обработки и анализа сигнала, вывода результатов на экран пользователя. Исходный код программного средства написан на языке программирования C++ с использованием библиотеки SoapySDR для взаимодействия с устройствами SDR и получения потоковых данных. Важным аспектом работы является использование технологий языка C++ для реализации параллельных вычислений методами многопоточного программирования. Такой подход позволит увеличить производительность анализатора и скорость обработки данных. Пользовательский интерфейс и вывод результатов реализованы возможностями фреймворка Qt.

Особый интерес представляет применение преобразования Фурье для восстановления исходного сигнала из дискретизированного по времени, и последующего вывода его визуального представления на экран пользователя.

Обзор эксперимента Google на 53-кубитном процессоре Sycamore

Шауро Виталий Павлович

Shaurkin@hotmail.com

В 2018 году компания Google опубликовала результаты эксперимента, демонстрирующего так называемое «квантовое превосходство» на 53-кубитном процессоре Sycamore [1]. Под «квантовым превосходством» понимается некий условный порог, когда квантовый компьютер демонстрирует значительные преимущества в решении какой-либо задачи по сравнению с современными классическими суперкомпьютерами. Публикация вызвала большой резонанс не только в научном сообществе, благодаря широкому освещению в популярных СМИ и соцсетях. К тому же интерес к данной работе подогревался еще до

публикации различными слухами о якобы большом прорыве, сделанном Google в области квантовых вычислений.

Суть эксперимента состояла в выполнении на квантовом процессоре сложной квантовой сети, содержащей большое количество случайно генерируемых однокубитных гейтов (рис.1). Подобная квантовая сеть является крайне сложной для симуляции на классическом компьютере и требует экспоненциального увеличения вычислительных ресурсов при линейном росте числа задействованных кубитов. Условным классическим аналогом такой сети может служить сеть, где однокубитные гейты заменены на классический логический оператор NOT, срабатывающих с вероятностью 50%. Очевидно, что такая классическая сеть каждый раз будет выдавать случайную битовую строку, т.е. генерировать белый шум. Однако в квантовом случае из-за наличия фазы и запутывающих гейтов CNOT в процессе вычисления будет происходить интерференция состояний кубитов. В результате, на выходе квантовой сети мы будем наблюдать экспоненциальное распределение вероятностей (распределение Портера-Томаса), когда получение некоторых битовых строк будет гораздо более вероятным, а для других вариантов вероятность может быть близка к нулю. Данная особенность квантовой случайной сети является ключевой для эксперимента, поскольку позволяет на несколько порядков уменьшить количество запусков квантовой сети, необходимых для анализа полученного распределения вероятностей битовых строк. Так, например, для сети из 53 кубитов всего возможно 2^{53} или $\sim 10^{16}$ различных вариантов выходных битовых строк. В обычной ситуации для корректной оценки распределения вероятностей этих строк, количество запусков алгоритма должно быть минимум на пару порядков больше этого числа. Однако из-за экспоненциального распределения можно ограничиться лишь $N \sim 10^6 - 10^7$ запусков, при этом связанная с этим упрощением ошибка пропорциональна $1/\sqrt{N}$.

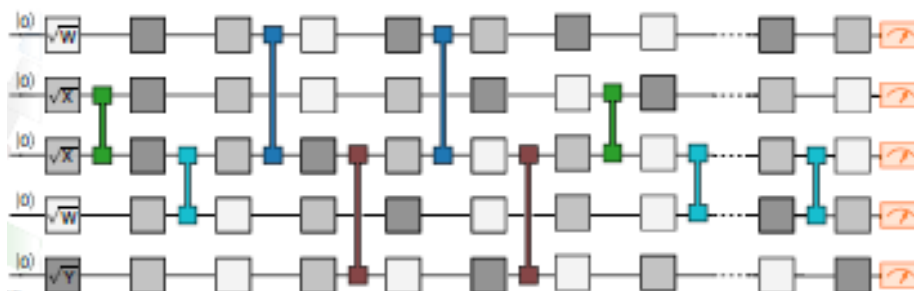


рис.1. Один из вариантов экспериментально реализованной квантовой сети [1]. Квадраты – однокубитные гейты, случайно выбираемые из 3 возможных вариантов $\sqrt{X}, \sqrt{Y}, \sqrt{W}$, где $W = (X + Y)\sqrt{2}$. Маленькие соединённые квадраты – гейты CNOT.

Для оценки точности экспериментальных данных авторы использовали методику кросс-энтропийного сравнения (cross-entropy benchmarking, XEB). Рассчитываемая функция точности F_{XEB} [1] в этом методе показывает, насколько полученное в эксперименте распределение вероятностей для битовых строк отличается от точного распределения, полученного из симуляции квантовой сети на классическом суперкомпьютере. При значении функции равном 1 мы имеем точное совпадение распределений, а значение 0 указывает, что квантовый процессор генерирует белый шум, т.е., по сути, переходит в классический режим работы. Рис.2а показывает значения F_{XEB} для трех вариантов квантовых сетей при увеличении количества кубитов в сети. Данный график является основным научным результатом эксперимента. Видно, что F_{XEB} быстро убывает с ростом числа кубитов, что связано с накоплением ошибок при выполнении квантовых гейтов. Тем не менее, экспериментальные значения хорошо согласуются с предсказаниями (сплошная линия), сделанными на основе теоретических моделей источников ошибок в процессоре. Данный результат, во-первых, показывает, что даже при большом количестве кубитов не возникает никаких непредвиденных новых механизмов ошибок. Во-вторых, процессор действительно работает в квантовом режиме, несмотря на высокий уровень ошибок при большом числе кубитов.

Рис.2b показывает уже больше «медийные» и дискуссионные результаты эксперимента. Увеличивая количество гейтов в сети, авторы перешли некий порог («квантовое превосходство»), когда уже невозможно выполнить симуляцию полной схемы (наиболее сложный вариант сети, с множеством связывающих кубиты вентилях CNOT) на классическом суперкомпьютере за приемлемое время. Путем экстраполяции авторы вычислили, что на симуляцию самой сложной экспериментально реализованной квантовой сети (более 1500 гейтов) суперкомпьютеру потребуются порядка 10000 лет, в то время как квантовый процессор выполняет 30 миллионов запусков за 200 секунд. Данные оценки вызвали немало критики в научном сообществе, как в части оценки времени классической симуляции, так и относительно «искусственности» выбранной задачи и, как следствие, невозможности ее практического применения.

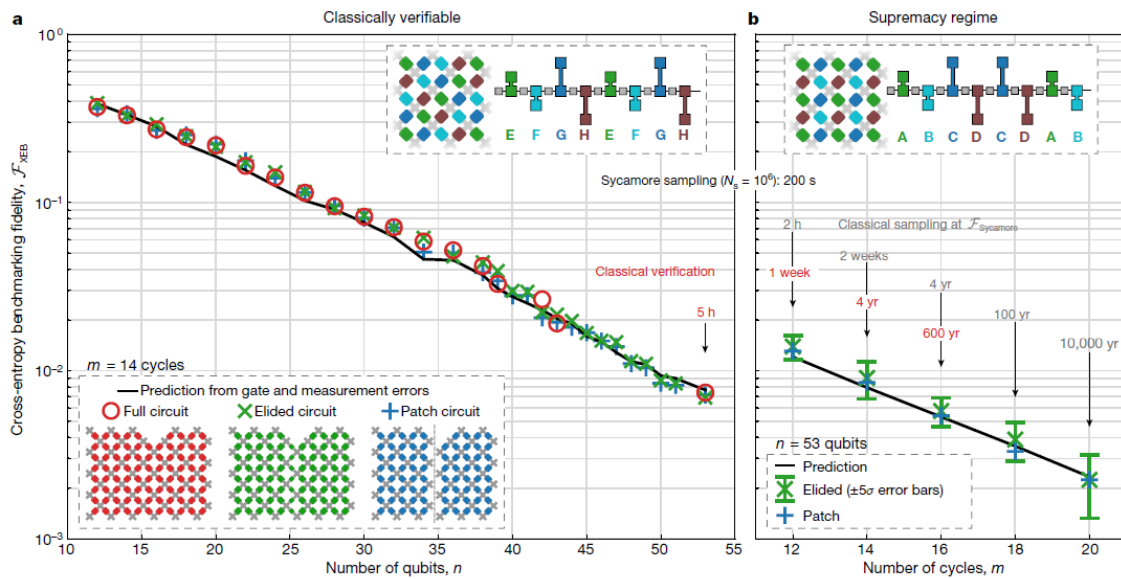


рис.2. Основные результаты эксперимента Google [1]: (a) Значения F_{XEB} при увеличении числа кубитов для трех вариантов квантовых сетей (полная и 2 упрощенных), сплошная линия – теоретические предсказания. (b) То же самое для 53 кубитов при увеличении числа гейтов в упрощенных схемах, приведены оценки для времени классической симуляции для полной схемы.

Список публикаций:

[1] Arute, F., Arya, K., Babbush, R. et al. // Nature 574, 505–510 (2019).

19 - Теплофизика и теплотехника. Процессы теплообмена

Деринг Екатерина Даниловна, 4 курс

Новосибирск, Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, физический
Особенности исследования процесса рассеяния частиц сверхзвукового кластированного потока методом молекулярно-пучковой масс-спектрометрии

Кирилл Алексеевич Дубровин

e-mail: e.dering@g.nsu.ru

стр. 288

Ковальчук Татьяна Николаевна, аспирант 1 года обучения

Тюмень, Тюменский государственный университет, физико-технический институт

Определение основных технологических параметров при пароциклической обработке скважин

Шевелёв Александр Павлович, к.ф.-м.н.

e-mail: t.n.kovalchuk@mail.ru

стр. 289

Смовж Дмитрий Владимирович, зав. лаб.

Новосибирск, Институт теплофизики им.С.С. Кутателадзе, физический

Теплофизические применения графена, полученного методом ХОГФ

e-mail: dsmovzh@gmail.com

нет

Чуприков Александр Иванович, магистрант 1 года обучения

Томск, Томский политехнический университет, инженерная школа ядерных технологий

Определение оптимальной скорости воздушных потоков в графитовом рассеивателе нейтронного излучения реактора ИРТ-Т

Кузнецов Михаил Сергеевич, к.т.н.

e-mail: chuprikovalexandr@gmail.com

стр. 291

Особенности исследования процесса рассеяния частиц сверхзвукового кластеризованного потока методом молекулярно-пучковой масс-спектрометрии

Деринг Екатерина Даниловна

Новосибирский национальный исследовательский государственный университет

Дубровин Кирилл Алексеевич

e.dering@g.nsu.ru

Исследование истечения газовых потоков, расширяющихся в сильно разреженное пространство или вакуум, является важной научно-технической задачей. Одним из направлений исследований в данной области является изучение потоков с развитой кластеризацией. Оно интересно как с точки зрения фундаментальных исследований Ван-дер-Ваальсовых кластеров, так и с точки зрения прикладных применений.

В работе [1] было обнаружено, что в условиях развитой конденсации помимо веретенообразной сверхзвуковой струи образуется вторичный поток («кластерный след»), предположительно состоящий из кластеров большого размера, способных преодолеть боковые скачки уплотнения струи. Объяснение обнаруженного эффекта будет возможно лишь при понимании процессов, протекающих в кластеризованных потоках. На одном из этапов данного исследования была инициирована серия экспериментов, направленная на изучение процесса рассеяния газовых кластеров методом молекулярно-пучковой масс-спектрометрии. Работа выполнена на вакуумном экспериментальном газодинамическом стенде «ЛЭМПУС-2» Отдела прикладной физики физического факультета НГУ [2].

При помощи квадрупольного масс-спектрометра были получены зависимости амплитуды сигнала, регистрируемого на оси молекулярного пучка, от давления рассеивающего газа для трех значений отношения m/e : 40, 80 и 120 а.е.м., соответствующих атомам аргона Ar, димерам Ar₂ и тримерам Ar₃, – из которых, согласно [3], были рассчитаны искомые значения сечения рассеяния.

На рис. 1 показаны типичные зарегистрированные данные, полученные при относительно небольшом значении среднего размера кластеров в потоке $\langle S \rangle = 48$ ат./кл., оцененного согласно [4]. На основе полученных данных были рассчитаны значения сечений рассеяния для атомов, димеров и тримеров: $3.9 \cdot 10^{-19}$, $1.7 \cdot 10^{-19}$ и $5.7 \cdot 10^{-20}$ м², соответственно. Данные измерения показали, что атомы аргона, обладая меньшим импульсом, сталкиваясь с частицами фонового газа, в сравнении с кластерами претерпевают более активное рассеивание, в связи с чем сигнал, зарегистрированный на изначальной линии движения, оказывается менее интенсивным.

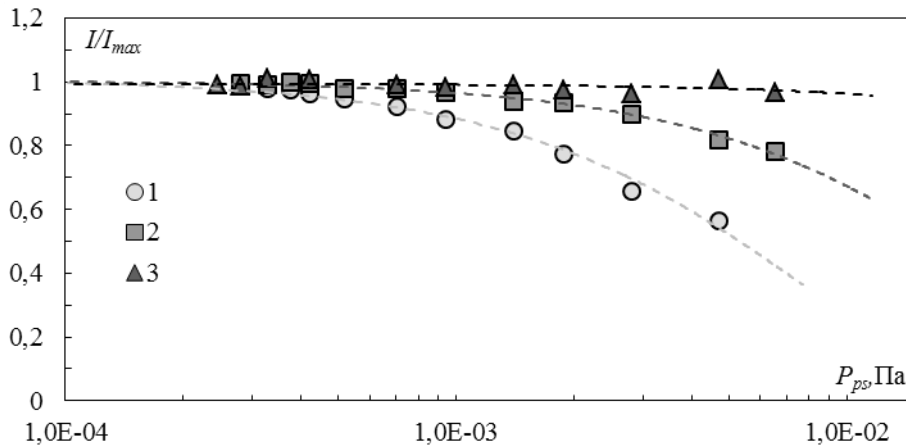


рис.1. Зависимость амплитуды сигнала, регистрируемого на оси молекулярного пучка, от давления в послескimmerной секции P_{ps} для $m/e = 40$ (1), 80 (2) и 120 (3), $\langle S \rangle = 48$ ат./кл.

Увеличение давления в форкамере сопла приводит к росту плотности в сверхзвуковом потоке и, следовательно, к росту формируемых кластеров в размерах. Было бы логично предположить, что результаты в условиях более высокой конденсации должны были дать те же зависимости, что и ранее. Однако при увеличении среднего размера кластеров в потоке были получены данные, противоречащие изначальному результату: профиль, соответствующий атомарному аргону, описывает менее активное рассеивание, нежели профили олигомеров (рис. 2).

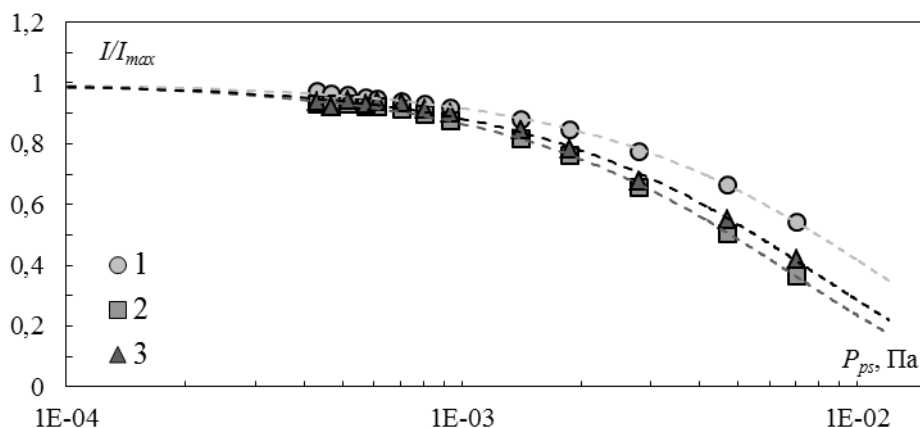


рис.2. Зависимость амплитуды сигнала регистрируемого на оси молекулярного пучка, от давления в постсольвентной секции P_{ps} для $m/e = 40$ (1), 80 (2) и 120 (3), $\langle S \rangle = 244$ ат./кл.

В докладе обсуждаются возможные причины возникновения данной аномалии, а также особенности использования метода молекулярно-пучковой масс-спектрометрии для исследования кластированных потоков и сложности интерпретации получаемых результатов.

Работа выполнена на оборудовании ЦКП «Прикладная физика» НГУ при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант №22-11-00080).

Список публикаций:

- [1] Зарвин А. Е. и др. О структуре сверхзвуковой струи в условиях развитой конденсации // Письма в Журнал технической физики. – 2015. – Т. 41. – №. 22. – С. 74-81.
- [2] Zarvin A. E. et al. Condensable supersonic jet facility for analyses of transient low-temperature gas kinetics and plasma chemistry of hydrocarbons // IEEE Transactions on Plasma Science. – 2017. – Т. 45. – №. 5. – С. 819-827.
- [3] Леонас В. Б. Современное состояние и некоторые новые результаты метода молекулярного пучка // Успехи физических наук. – 1964. – Т. 82. – №. 2. – С. 287-323.
- [4] Hagena O. F. Nucleation and growth of clusters in expanding nozzle flows // Surface Science. – 1981. – Т. 106. – №. 1-3. – С. 101-116.

Определение основных технологических параметров при пароциклической обработке скважин

Ковальчук Татьяна Николаевна

Гильманов Александр Янович

Тюменский государственный университет

Шевелёв Александр Павлович, к.ф.-м.н.

t.n.kovalchuk@mail.ru

Пароциклическая обработка пласта (ПЦО) является одним из наиболее распространенных тепловых методов увеличения нефтеотдачи (МУН) [1]. ПЦО осуществляют периодическим нагнетанием пара в нефтяной пласт через добывающую скважину, при этом с некоторой выдержкой ее в закрытом состоянии и последующей эксплуатацией той же скважины для добычи нефти с пониженной вязкостью и сконденсированного пара. Основная цель этой технологии состоит в том, чтобы снизить вязкость нефти и, следовательно, увеличить приток нефти к скважине [2]. Среди преимуществ ПЦО выделяют относительно быстрое получение нефти, простоту внедрения, необходимость наличия только одной скважины и высокую тепловую эффективность. Актуальность данной работы обусловлена тем, что в настоящее время увеличивается доля трудноизвлекаемых высоковязких запасов нефти, при этом моделирование процесса ПЦО и оптимизация технологических параметров позволяют существенно повысить эффективность воздействия [3,4].

Поэтому в данной работе была поставлена цель разработать методику для оценки основных технологических параметров ПЦО при которых достигается максимальное значение дополнительной накопленной добычи нефти с учетом распределения температуры вдоль ствола скважины, полученного по данным кратковременных динамических температурных исследований. Научная новизна работы состоит в том, что предлагается комплексный подход, связывающий задачи движения теплоносителя вдоль ствола скважины и определения оптимальных параметров ПЦО, уточняется значение коэффициента теплопередачи породы. Для

достижения поставленной цели используется описание процесса ПЦО, основанное на составлении системы из законов сохранения.

Для достижения поставленной цели были сформулированы две задачи: внутренняя и внешняя. Внутренняя задача предполагает расчёт параметров теплоносителя (давления, температуры и сухости пара) от устья до забоя вдоль ствола скважины. Решение внешней задачи позволяет определить температурное распределение в многослойной стенке скважины и породе вдоль радиальной координаты r . При определении оптимальных параметров ПЦО используется допущение о цилиндрической области прогрева пласта. Схематическое изображение такой области показано на рис.1, где r_f – максимальный радиус фронта прогрева, r^* – радиус фронта прогрева в некоторый момент времени после закрытия скважины на паротепловую пропитку, h – мощность пласта [5]. В том числе при математической постановке задачи принимаются следующие допущения: модель является односкоростной, пар не проскальзывает относительно воды; температура пароводяной смеси в сечении одинакова; система находится на линии насыщения; рассматривается двухфазное приближение; нестационарными эффектами пренебрегается; газ считается идеальным.

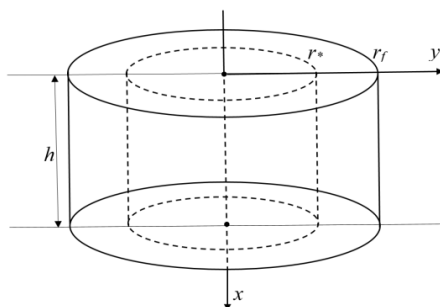


рис.1. Схематическое изображение цилиндрической области прогрева пласта

В работе были получены следующие результаты: значения скорости v , давления P и сухости пара C в зависимости от значения вертикальной координаты z (рис. 2); распределение температуры в теплоизолирующей стенке скважины и породе; уточненный коэффициент теплопередачи породы; значения времени закачки теплоносителя, выдержки скважины на конденсацию и времени добычи нефти при которых дополнительная накопленная добыча нефти максимальна; рассчитано максимальное значение дополнительной накопленной добычи нефти.

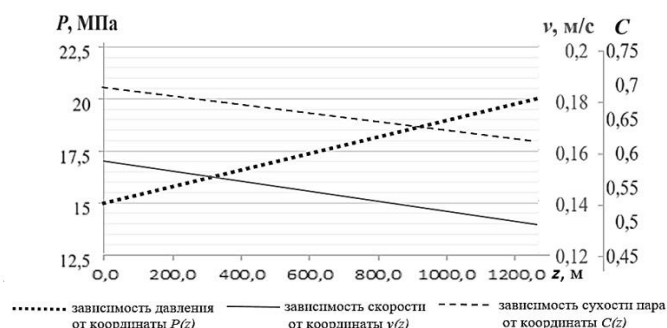


рис.2. Результаты вычислений для значений скорости, давления и сухости пара в зависимости от значения вертикальной координаты

Список публикаций:

- [1] Еремин Н.А. Цифровые технологии извлечения запасов нетрадиционной нефти. Известия ТулГУ. Науки о Земле. Вып. 2. Геотехнология. 2022. 255 с.
- [2] Shaken M. S., Zhiyengaliyev B. Y., Mardanov A. S., Dauletov A. S. Designing the Thermal Enhanced Oil Recovery as a Key Technology of High Viscosity Oil Production. Society of Petroleum Engineers. SPE-207059-MS. 2021.
- [3] Bao Yu, He L., Lv X., Shen Ya., Ya. Z. An Evaluation of Enhanced Oil Recovery Strategies for Extra Heavy Oil Reservoir after Cold Production without Sand in Orinoco, Venezuela. Society of Petroleum Engineers. SPE-191177-MS. 2018. 18 p.
- [4] Грушевенко Е. Перспективы развития третичных МУН в мире и в России. Skolkovo Moscow School of Management. 2021. 40 с.
- [5] Ковальчук Т.Н., Гильманов А. Я., Шевелёв А. П. Физико-математическое моделирование пароциклического воздействия на нефтяные пласты. Вестник Тюменского государственного университета. Физико-математическое моделирование. Нефть, газ, энергетика. 2020. Том 6, № 1 (21). С. 176–191.

Определение оптимальной скорости воздушных потоков в графитовом рассеивателе нейтронного излучения реактора ИРТ-Т

Чуприков Александр Иванович

Долматов Олег Юрьевич, Кузнецов Михаил Сергеевич, Рудников Никита Андреевич

Национальный исследовательский Томский политехнический университет

Кузнецов Михаил Сергеевич

aic13@tpu.ru

Исследовательские реакторы – это ядерные реакторы, которые используются в различных сферах научных исследований, разработок и образования. Реактор типа ИРТ-Т, расположенный в городе Томск, используется для исследований в различных областях: нейтронно-трансмутационное легирование, наработка медицинских и технических изотопов и нейтрон-захватная терапия (НЗТ).

Одним из перспективных направлений исследований является НЗТ, которая является одним из способов лечения онкологических заболеваний. На базе реактора ИРТ-Т изучается возможность проведения НЗТ с применением изотопа гадолиния Gd157, более дешёвым аналогом В10.

В данной работе представлены расчётные и экспериментальные результаты моделирования в SOLIDWORKS скорости воздушных потоков, а также верификация модели графитового рассеивателя нейтронного излучения, который будет расположен в горизонтальном экспериментальном канале ГЭК-1 реактора ИРТ-Т.

Результаты моделирования скорости воздушных потоков в SOLIDWORKS представлены на рисунке 1.

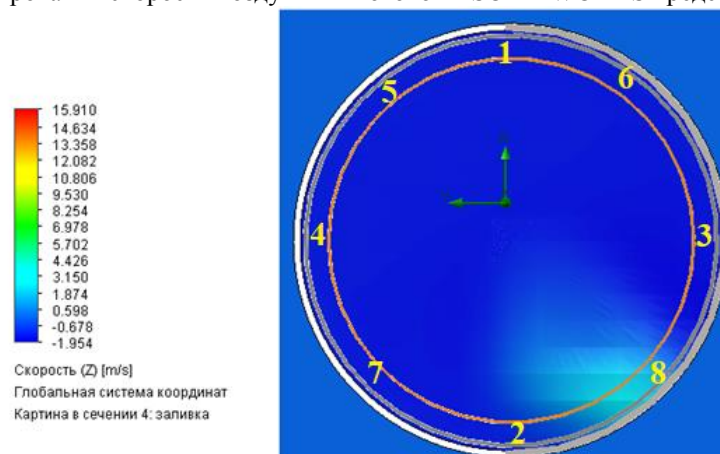


рис 1. Модель распределения скорости воздушных потоков для 1 – 8 регистрационной зоны

Сравнение результатов моделирования и эксперимента представлено на рисунке 2. Максимальное отклонение результатов моделирования от эксперимента составляет 9% для второй регистрационной зоны.

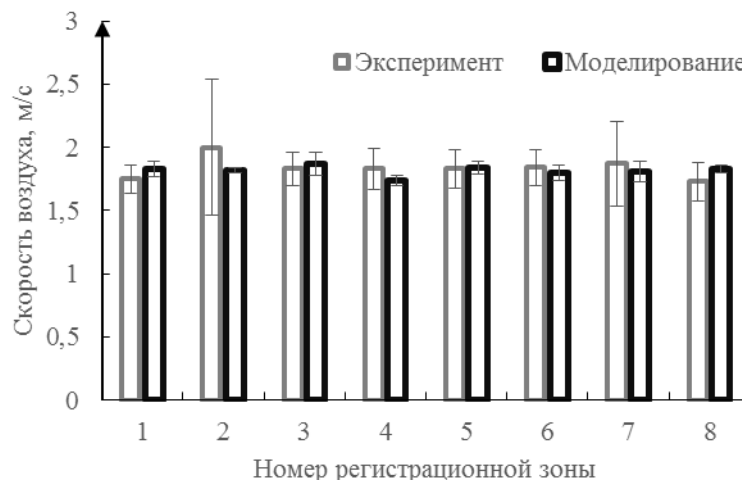


рис 2. Сравнение результатов моделирования и эксперимента

Модель графитового рассеивателя нейтронного излучения представлена на рисунке 3.

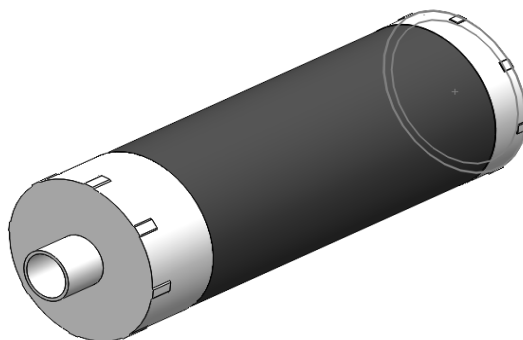


рис 3. Модель рассеивателя нейтронов

При проведении эксперимента и моделирования системы охлаждения рассеивателя нейтронного излучения были выбраны следующие расходы на выходе: 50 м³/ч, 100 м³/ч, 150 м³/ч для определения наиболее оптимального и способного обеспечить безопасную эксплуатацию исследовательского реактора ИРТ-Т

Также в данной работе определен эксплуатационный режим работы системы охлаждения и проведен анализ внештатных ситуаций при эксплуатации рассеивателя.

Список публикаций:

[1] *Моделирование теплофизических процессов в реакторной установке ВВЭР-1000 с использованием программного комплекса SolidWorks = Simulation of thermal processes in a VVER-1000 reactor unit using the SolidWorks software complex / О. Ю. Долматов, Р. С. Шурыгин, М. Д. Юрченко [и др.] // Научно-технический вестник Поволжья . — 2020 . — № 9 . — [С. 44-48*

[2] *Чуприков, Александр Иванович. Определение теплофизических параметров графитового рассеивателя нейтронного излучения реактора ИРТ-Т / А. И. Чуприков, Н. В. Смольников // Физико-технические проблемы в науке, промышленности и медицине сборник тезисов докладов XI Международной научно-практической конференции, г. Томск, 07–09 сентября 2022 г.: / Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Инженерная школа ядерных технологий ; ред. кол. А. Г. Горюнов, О. Ю. Долматов, А. О. Семенов, Е. С. Сухих . — Томск : Изд-во ТПУ , 2022 . — [С. 76]*

20 - Физика и экология. Экологические проблемы в энергетике

Бобылев Вячеслав Александрович, магистрант 1 года обучения

Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, Институт физики

Удельная активность ^{137}Cs в почвах зоны наблюдения Волгодонской (Ростовской) АЭС

Бураева Елена Анатольевна, к.х.н.

e-mail: slava_bobelev@mail.ru стр. 295

Бураева Елена Анатольевна, в.н.с.

Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, Научно-исследовательский институт физики

Радионуклиды в съедобных и условно-съедобных грибах

e-mail: buraeva_elen@mail.ru стр. 296

Дубров Никита Иванович, 4 курс

Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический

Оценка влияния Новочеркасской ГРЭС на радиационную обстановку Октябрьского района Ростовской области

Бураева Елена Анатольевна, к.х.н.

e-mail: nikita.dubrov@bk.ru стр. 298

Калашникова Карина Александровна, 4 курс

Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический

Особенности распределения гамма-фона в малых и средних городах Ростовской области

Бураева Елена Анатольевна, к.х.н.

e-mail: kalashnikoa.karina@mail.ru стр. 300

Маломыжева Наталья Викторовна, магистрант 2 года обучения

Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический

Удельная активность ^{137}Cs в почвах Ростовской области на территориях с различной антропогенной нагрузкой

Бураева Елена Анатольевна, к.х.н.

e-mail: llia.2013@yandex.ru стр. 301

Медведев Вадим Викторович, 5 курс

Томск, Томский политехнический университет, инженерная школа ядерных технологий

Использование биолюминесцентных систем для мониторинга воздействия гуминовых веществ на радиоактивные растворы

Сачкова Анна Сергеевна, к.б.н.

e-mail: vvm54@tpu.ru стр. 303

Плахотняя Дарья Павловна, магистрант 1 года обучения

Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, Научно-исследовательский институт физики

Радиоэкологический мониторинг на территориях городских округов Краснодарского края

Бураева Елена Анатольевна, к.х.н.

e-mail: dplakhotnyaya@bk.ru стр. 304

Полянский Дмитрий Александрович, доцент

Владивосток, Дальневосточный федеральный университет, ИНТиПМ

Исследование радиационной опасности углей, применяемых в системах твердотопливного отопления в Приморском крае

e-mail: polyanskiy.da@dvfu.ru стр. 305

Рудников Никита Андреевич, магистрант 1 года обучения

Томск, Томский политехнический университет, инженерная школа ядерных технологий

Возможность применения легких водородосодержащих материалов в качестве биологической защиты от нейтронного излучения

Кузнецов Михаил Сергеевич, к.т.н.

e-mail: nar11@tpu.ru стр. 306

Сайфудинов Тимур Каноатшохович, 4 курс
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
Мониторинг радиационной обстановки возле Ростовской АЭС
Бураева Елена Анатольевна, к.х.н.
e-mail: tima.saufydionv2001@gmail.com стр. 307

Тайлашева Ксения Алексеевна, аспирант 1 года обучения
Томск, Томский политехнический университет, -
Результаты оценок вертикальной компоненты скорости частиц выбросов промышленных предприятий
Рыжакова Надежда Кирилловна, к.ф.-м.н.
e-mail: kat14@tpu.ru стр. 308

Татаринцева Мария Алексеевна, 3 курс
Томск, Томский политехнический университет, отделение ядерно-топливного цикла
Мониторинг загрязнения от угольной промышленности
Рогова Наталья Сергеевна, к.т.н.
e-mail: mat30@tpu.ru стр. 310

Филинкова Марина Сергеевна, аспирант 2 года обучения
Екатеринбург, Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН
Магнитные системы для осаждения наночастиц из водных сред
Медведева Ирина Владимировна, д.ф.-м.н.
e-mail: filinkova-ms@yandex.ru стр. 311

Чепан Алексей Русланович, магистрант 2 года обучения
Томск, Томский политехнический университет, инженерная школа ядерных технологий
Нейтронно-физический расчёт ВВЭР-1000 с толерантным топливом
Кузнецов Михаил Сергеевич, к.т.н.
e-mail: arc3@tpu.ru стр. 312

Шаповалов Егор Сергеевич, 4 курс
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
Распределение мощности эквивалентной дозы гамма-излучения в населённых пунктах Чертковского района Ростовской области
Бураева Елена Анатольевна, к.х.н.
e-mail: yegor.shapovalov.01@mail.ru стр. 313

Швецова Дарья Алексеевна, магистрант 2 года обучения
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
Сравнительная характеристика поверхностного распределения радионуклидов в зоне чернозёмных почв природных, природно-техногенных и урбанизированных территорий Ростовской области
Бураева Елена Анатольевна, к.х.н.
e-mail: dashik.shvet@yandex.ru стр. 314

Штыфлюк Мария Евгеньевна, м.н.с.
Москва, Московский областной научно-исследовательский клинический институт им. М. Ф. Владимирского, лаб. медико-физических исследований
Оценка содержания радона в помещениях корпуса `Е` ДВФУ и выработка рекомендаций по снижению его влияния на организм
Полянский Дмитрий Александрович, к.ф.-м.н.
e-mail: shtyfliuk.me@students.dvfu.ru стр. 316

Шульга Всеволод Владимирович, 4 курс
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
Мощность эквивалентной дозы в рабочих и жилых помещениях ст. Староминской Краснодарского края
Бураева Елена Анатольевна, к.х.н.
e-mail: ssevashulga@mail.ru стр. 317

Удельная активность ^{137}Cs в почвах зоны наблюдения Волгоградской (Ростовской) АЭС

Бобылев Вячеслав Александрович

Костырев Борис Павлович, Павленко Алексей Сергеевич, Плахотняя Дарья Павловна

Южный федеральный университет

Бураева Елена Анатольевна, к.х.н.

slava_bobelev@mail.ru

В настоящее время многие предприятия ядерной топливной энергетики могут быть потенциальными источниками поступления в окружающую среду искусственных радионуклидов (ИРН). В Ростовской области таким предприятием является Ростовская (Волгоградская) АЭС (РоАЭС).

Целью данной работы является изучение распределения искусственного радионуклида ^{137}Cs в почвах тридцатикилометровой зоны наблюдения Ростовской АЭС. Объектами исследования настоящей работы является почвы степной зоны данного региона, находящиеся в 30-километровой зоне наблюдения Ростовской АЭС. Пробы почв отбирались каждый год на протяжении более 20 лет с 1999 года в летний сухой период. Перед отбором проб на всех контрольных участках зоны наблюдения РоАЭС выполнялась гамма-дозиметрия с использованием дозиметров-радиометров типа ДРБП-03, СРП-88н, ДКС-96. Удельную активность радионуклидов в почвах определяли на гамма-спектрометре «Прогресс-гамма скинтилляционный». Использовали стандартные методики отбора и подготовки проб почвы.

Распределение мощности эквивалентной дозы гамма-излучения (МЭД, гамма-фон) (рис.1) на территории РоАЭС не подчиняется ни нормальному, ни логнормальному распределению. Гамма-фон в зоне наблюдения РоАЭС с 2000 по 2021 гг. не изменяется и в среднем составляет 0,13-0,14 мкЗв/ч, что не превышает допустимый гамма-фон [1], с максимальным значением в 0,24 мкЗв/ч. Полученные значения совпадают с [2] и не превышают результаты предпускового радиоэкологического мониторинга («нулевого фона») зоны наблюдения РоАЭС, проводимого в 1999-2000 годах.

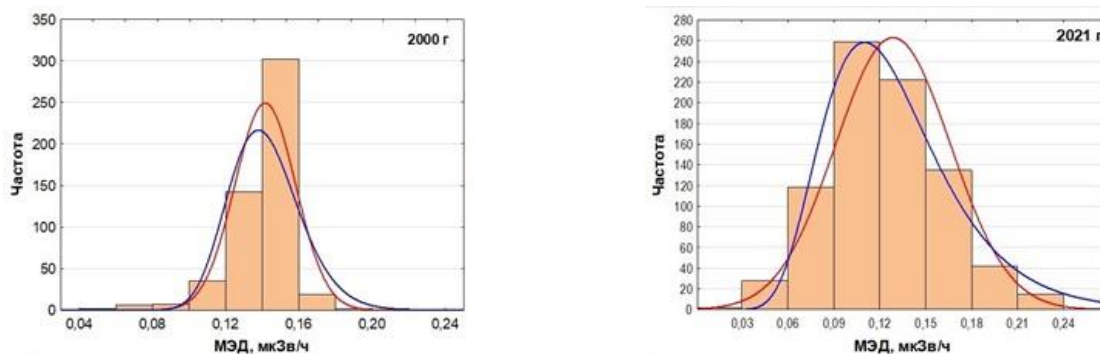


рис.1. Диаграмма распределения мощности эквивалентной дозы гамма-излучения на высоте 1 метр от поверхности почвы в зоне наблюдения Ростовской АЭС

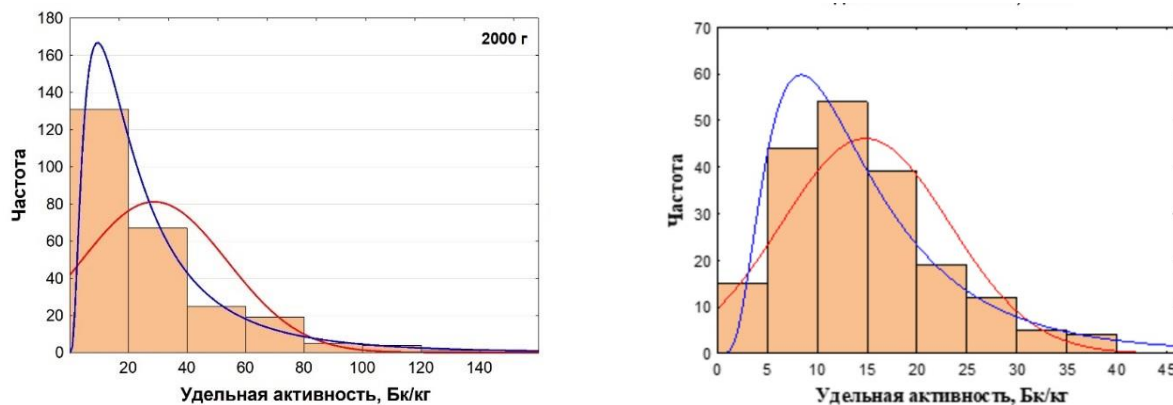


рис.2. Диаграмма распределения ^{137}Cs в 0–10 см слое почвы Ростовской АЭС

Распределение удельной активности ^{137}Cs (рис.2) близко к логнормальному распределению. Удельная активность колеблется от 1 до 156 Бк/кг, со средним значением в 32,6 Бк/кг. В 2019 году минимальное и максимальное значение удельной активности ^{137}Cs в почве 0,7 Бк/кг и 55,3 Бк/кг соответственно и со средним арифметическим и средним геометрическим значением в 14,7 и 12,5 Бк/кг, соответственно. Полученные

результаты радиоцезия в почвах зоны наблюдения РоАЭС соответствует среднемировым значениям удельной активности и характерны для Ростовской области.

Запасы по почвенному профилю ^{137}Cs с 2000 года в целом уменьшаются. Стоит выделить контрольный участок 3, на котором запас ^{137}Cs выше значений 2000 года, это связано с вынужденным смещением данного контрольного участка с выровненной территории на пологий склон овражно-балочной системы. На данном участке происходит непрерывный смыв радиоцезия по склону с его последующим накоплением на дне балки.

В целом, за многолетний период наблюдения удельная активность ^{137}Cs непрерывно снижается. В дальнейших исследованиях, для оценки влияния Ростовской АЭС на содержание радиоцезия в почвах будет оценен его суммарный запас по глубине почвенного профиля.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности 2023 г.). Проект № FENW-2023-0010/(Г30110/23-11-ИФ).

Список публикаций:

[1] СанПин 2.6.1.2523-09 Нормы радиационной безопасности (НРБ-99/2009). Утверждены и введены в действие постановлением Главного государственного санитарного врача Российской Федерации Г.Г. Онищенко от 7 июля 2009 г. № 47 с 01 сентября 2009 г.

[2] В.М. Шершаков, Булгаков В.Г., Крышев И.И., Вакуловский С.М., Каткова М.Н., Ким В.М., Крышев А. И. Радиационная обстановка на территории России и сопредельных государств в 2018 году // Обнинск – 2019 – С. 228-234.

[3] A. M. Hejl, G.D. Roger Ottmar, J. Timothy, T. P Eddy, S.L. Rathbun, A. A. Commodore, J. L. Pearce, L. P. Naeher Radionuclide activity concentrations in forest surface fuels at the Savannah River Site // Journal of Environmental Management – 2013 – №115 – P. 217-226.

[4] Marie Edena, Bernhard Felbermeier, Reinhard Mosandl, Jörg Völkela. Vertical distribution of ^{137}Cs in the contaminated soil of a spruce forest in southern Germany 12 years after regeneration cutting // Forest Ecology and Management – 2017 – №406 – P. 402-409.

Распределение радионуклидов в съедобных и условно съедобных грибах

Республики Адыгея

Бураева Елена Анатольевна

Антонова Елизавета Юрьевна, Маломыжева Наталья Викторовна

Южный федеральный университет

buraeva@sfedu.ru

Одними из важнейших биоиндикаторов загрязненности почвы являются объекты микофлоры (грибы), так как способны в значительных количествах накапливать различные поллютанты в том числе и радионуклиды. С учетом того, что во многих регионах как Российской Федерации, так и в разных странах мира дикорастущие грибы активно собираются для употребления в пищу, то оценка удельной активности радионуклидов в грибах является достаточно актуальной задачей. Ниже (на *рис. 1* и *табл.*) представлены результаты статистической обработки данных по концентрации радионуклидов в грибах, отобранных на различных площадках Майкопского района Республики Адыгея.

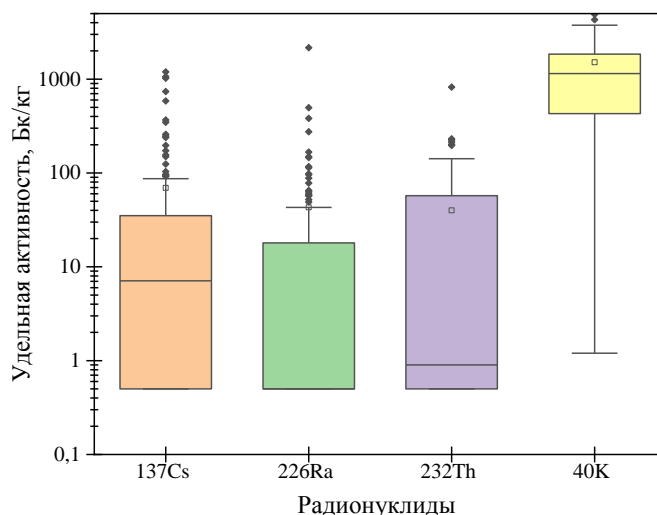


рис.1 Удельная активность радионуклидов в грибах горной Адыгеи

Параметр	Радионуклиды			
	^{137}Cs	^{226}Ra	^{232}Th	^{40}K
Минимум, Бк/кг	0,5	0,5	0,5	1,2
Максимум, Бк/кг	1194,0	2163,2	823,0	8919,0
Среднее арифметическое, Бк/кг	69,5	43,0	40,0	1513,7
Среднее арифметическое в почвах, Бк/кг	35,7	25,0	30,3	425,1
Среднее геометрическое, Бк/кг	0,5	1,9	1,0	100,0
Медиана, Бк/кг	7,1	0,5	0,9	1145,5
Мода, Бк/кг	0,5	0,5	0,5	1,2
Стандартная ошибка, Бк/кг	17,0	18,0	7,8	141,9
Количество образцов, шт	126			

Как правило, в большинстве проб грибов, в среднем удельная активность ^{226}Ra и ^{232}Th сопоставима в пределах погрешности с концентрацией данных радионуклидов в почвах. При этом радиоцезия в грибах больше в два раза, а ^{40}K – в три раза, чем в почвах (табл.). Такие различия в активности радионуклидов в грибах и почвах позволяют подтвердить выводы о значительных сорбционных способностях грибов.

Ниже, на рис. 2, представлено распределение радионуклидов в грибах на разных контрольных площадках Республики Адыгея. Максимальные концентрации радионуклидов в грибах фиксируются на КУ РЛ – площадка расположена на дне и в нижней части склонов гранитного ущелья (почвы – ранкеры лесные). Высокое содержание радионуклидов в подстилающих породах (в особенности ^{40}K), биогенные свойства калия и его значительная водорастворимость в совокупности с ландшафтно-климатическими условиями КУ (высокая влажность почвы) создают все условия для поступления радионуклидов в грибы.

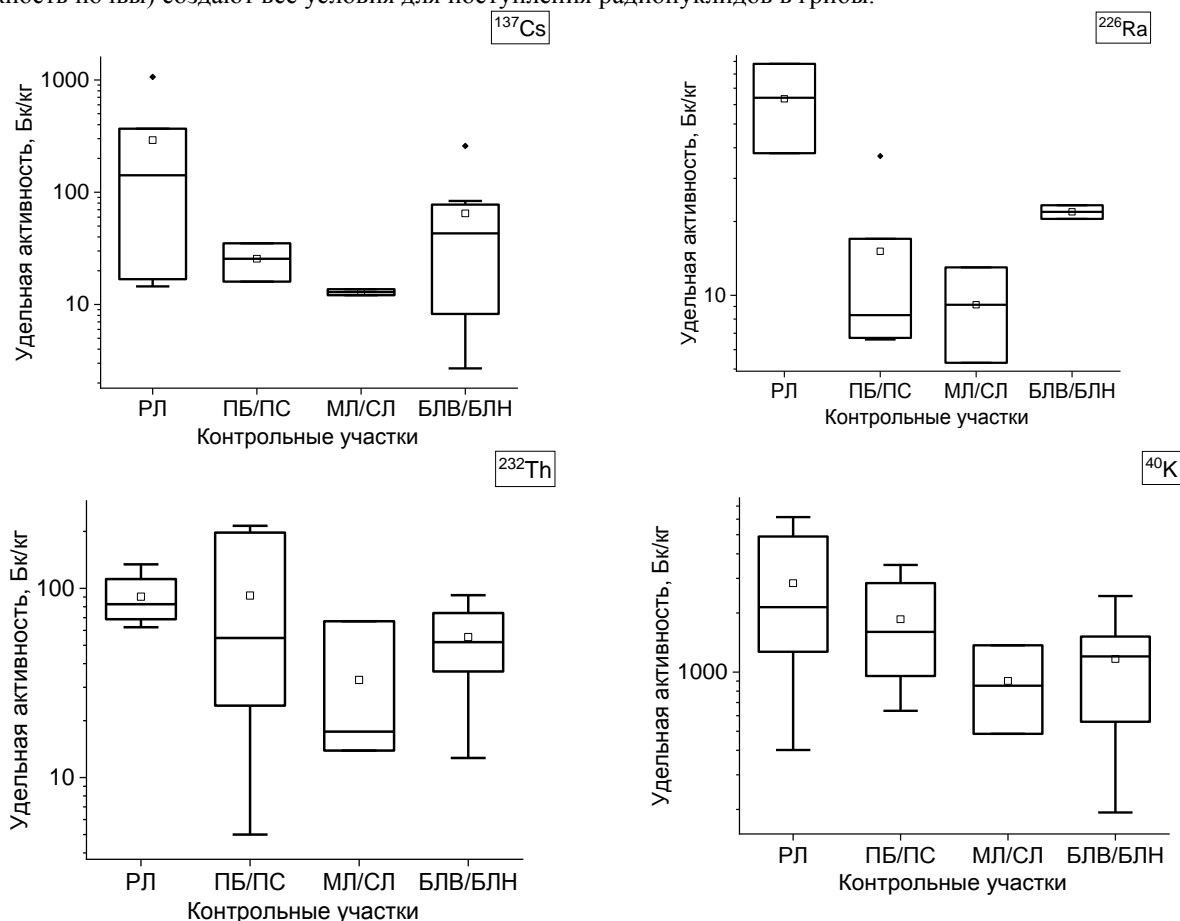


рис. 2 Распределение радионуклидов в грибах по контрольным участкам Республики Адыгея

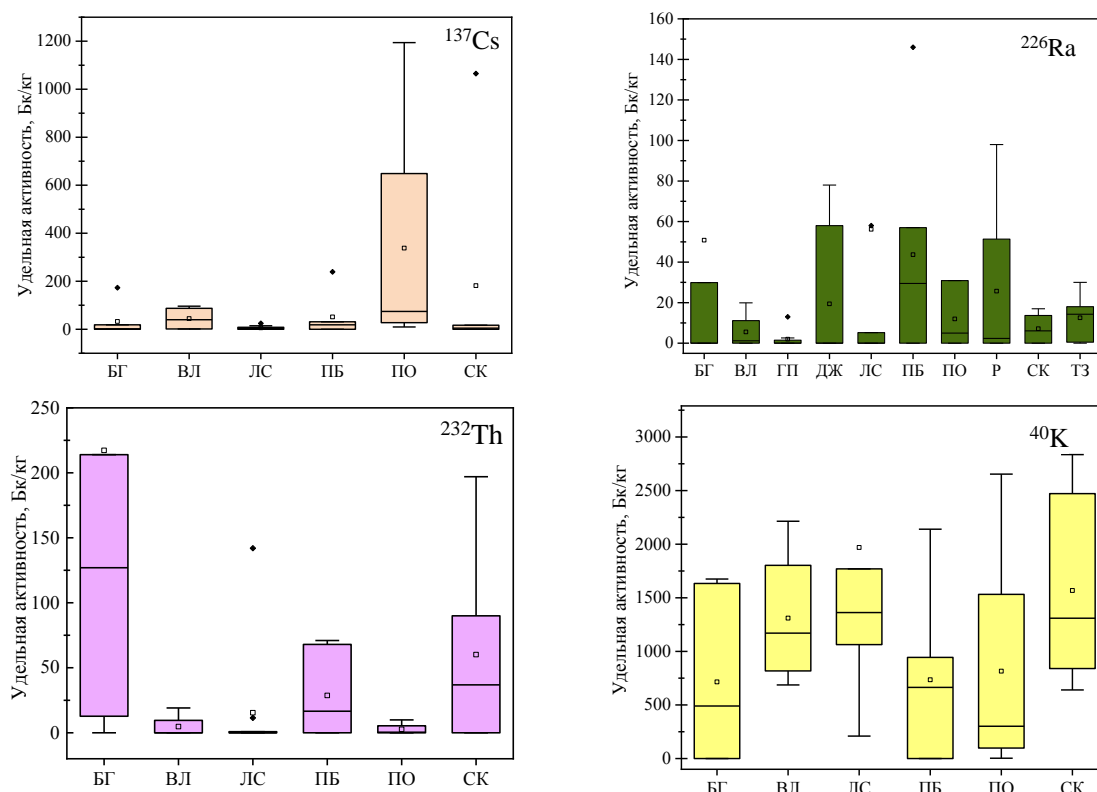


рис. 3. Распределение радионуклидов в грибах Адыгеи: БГ – белый гриб, ВЛ – валуй, ЛС – лисички, ПБ – подберезовик, ПО – подосиновик, СК – сыроежка красная

Анализ распределения удельной активности радионуклидов в различных видах грибов показал, что максимальной удельной активностью ^{137}Cs характеризуются подосиновики – до 1200 Бк/кг (рис. 3). Минимальная удельная активность ^{137}Cs отмечается в лисичках. В исследуемых пробах грибов отмечается высокая концентрация ^{40}K и ^{232}Th , особенно интенсивно данные изотопы накапливают сыроежки. Хочется отметить, что содержание ^{40}K во всех исследуемых образцах грибов превышает значения удельной активности верхнего слоя почв исследуемой территории в 1,5–2 раза. Содержание ^{226}Ra повышенное во всех исследуемых образцах, это может быть связано с тем, что в регионе распространены подстилающие породы с высоким содержанием радионуклидов ряда урана и значительным калиевым метасоматозом (например, граниты). Почвы достаточно каменистые и грибы могут механически загрязняться радионуклидами с частицами почвы. Также следует принимать во внимание, что данный регион активно используется населением для сбора дикорастущих грибов. И с учетом того, что плодовое тело гриба живет, в среднем, от нескольких дней до нескольких недель – лисички и грузди, в своей массе собирались 2–5-дневные, сыроежки, подберезовики, белые грибы и подосиновики встречались, как правило, достаточно старые. Поэтому при анализе степени накопления радионуклидов грибами стоит учитывать еще и возраст гриба.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности 2023 г.). Проект № FENW-2023-0010/(Г30110/23-11-ИФ)

Оценка влияния Новочеркасской ГРЭС на радиационную обстановку Октябрьского района Ростовской области

Дубров Никита Иванович
Южный федеральный университет
Бураева Елена Анатольевна, к.х.н.
nikita.dubrov@bk.ru

Исследований по радиационной обстановке на территориях сельских поселений в районе расположения станций или каких-либо других предприятий всегда будет не хватать из-за малозначительности отдалённых малонаселённых пунктов. Однако они имеют большое значение, так как ТЭС, широко использующие горючие

ископаемые, влияют на окружающую среду и населенные пункты. Поэтому данная работа сможет помочь оценке влияния предприятий топливной энергетики на радиационную обстановку.

Город Новочеркасск и Октябрьский район Ростовской области, находящиеся в зоне влияния Новочеркасской ГРЭС, являются одними из самых экологически неблагополучных территорий Ростовской области. Радиационный фон (мощность эквивалентной дозы гамма-излучения, МЭД) в г. Новочеркасске, в том числе в районе размещения различных крупных предприятий находится в диапазоне от 0,10 до 0,15 мкЗв/ч. При этом большая часть данных за несколько лет варьируется в районе 0,15 мкЗв/ч. Значения гамма-фона не превышают в НРБ-99/2009, равные 0,3 мкЗв/ч, а многолетний мониторинг показал, что МЭД держится примерно на одном уровне. Хотя сам Новочеркасск находится в зоне риска повышения концентраций отравляющих веществ. Основным источником загрязнения окружающей среды являются выбросы предприятий (тяжелые металлы и радионуклиды), которые попадают в почву [1-4].

В данной работе проведен анализ данных МЭД, полученных на территории сельских поселений Октябрьского района в районе расположения Новочеркасской ГРЭС Ростовской области. Гамма-фон измеряли на высоте 100 см от поверхности почвы. Использовали дозиметр-радиометр СРП-88Н. Методики измерений гамма-фона на открытой местности и в жилых помещениях применялись стандартные [5-8].

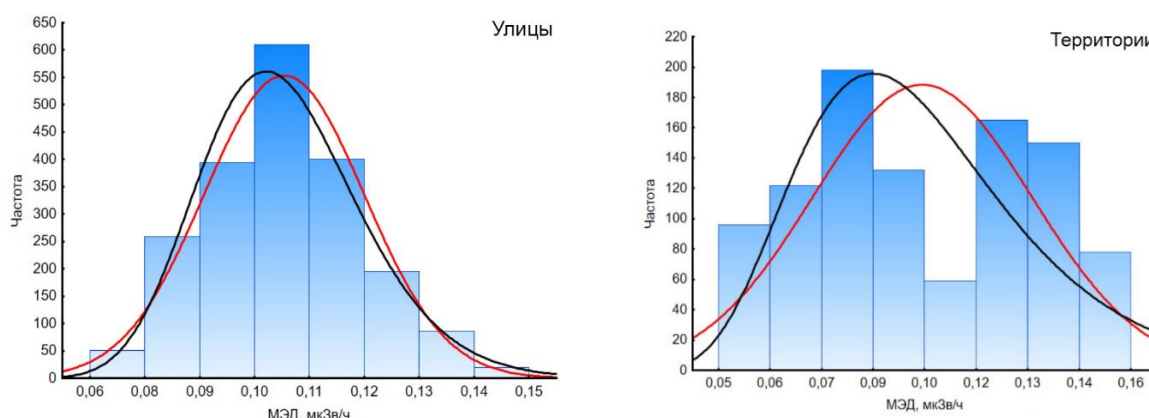


рис. 1. МЭД на улицах и территориях поселений Октябрьского района

Параметр	Улицы	Территории
Минимум, мкЗв/ч	0,065	0,046
Максимум, мкЗв/ч	0,149	0,157
Среднее арифметическое, мкЗв/ч	0,102	0,100
Среднее геометрическое, мкЗв/ч	0,107	0,096
Медиана, мкЗв/ч	0,103	0,095
Мода, мкЗв/ч	0,103	0,076
Стандартная ошибка, мкЗв/ч	0,0003	0,0009
Стандартное отклонение, мкЗв/ч	0,015	0,029
Дисперсия выборки	0,0002	0,0009
Экцесс	-0,170	-1,234
Асимметричность	0,224	0,068
Распределение Колмогорова-Смирнова D/D _{табл}	0,056/0,030	0,114/0,043
Количество измерений, шт	2016	1000

В целом гамма-фон в регионе исследования характерен для Ростовской области, соответствует Нормам радиационной безопасности Российской Федерации (НРБ-99/2009) [9-10].

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности 2023 г.). Проект № FENW-2023-0010/(Г30110/23-11-ИФ).

Список публикаций:

[1]. Дергачева А. В. И др. МЭД гамма-излучения в районе предприятия топливной энергетики в г. Новочеркасск, Ростовская область. // Материалы XII Международной студенческой научной конференции «Студенческий научный форум» – 2020.

- [2]. Михайлова Т. А. и др. Особенности распределения естественных и искусственных радионуклидов в системе почва-растения на территории Новочеркасской ГРЭС. // Материалы XII Международной студенческой научной конференции «Студенческий научный форум» – 2020.
- [3]. Горбунов А. С. И др. Радиационная обстановка в г. Новочеркасске Ростовской области. // Открытый конкурс исследовательских лабораторий ЮФУ – 2020.
- [4]. Федченко Т. М. и др. Содержание и распределение радионуклидов в почвах территории Новочеркасской ГРЭС. // Фундаментальные исследования. – 2013. – №11 (часть 3) – С. 488-492.
- [5]. МВК 2.2.3(50)-11 Методика дозиметрического контроля территории на участках застройки – М.: ВНИИ ФТРИ, 2011. – 15с.
- [6]. МУ 2.6.2398-08 Радиационный контроль и санитарно-эпидемиологическая оценка земельных участков под строительство жилых домов, зданий и сооружений общественного и производственного назначения в части обеспечения радиационной безопасности // М.: Федеральный центр гигиены и эпидемиологии Роспотребнадзора. 2009. 27с.
- [7]. МВК 5.6(38)-11 Методика дозиметрического контроля объектов, содержащих ЕРН // Ростовна-Дону: типография ЮФУ, 2011. – 13с.
- [8]. ЖШП.289.386 ПС Прибор геологоразведочный сцинтилляционный СРП-88Н. Паспорт.
- [9]. СанПиН 2.6.1.2523-09 Нормы радиационной безопасности (НРБ-99/2009) // Министерство юстиции Российской Федерации. 2009.
- [10]. СанПиН 2.6.1.2612-10 Основные санитарные правила обеспечения радиационной безопасности (ОСПОРБ-99/2010) // Министерство юстиции Российской Федерации. 2010.

Особенности распределения гамма-фона в малых и средних городах Ростовской области

Калашикова Карина Александровна
Южный федеральный университет
Бураева Елена Анатольевна, к.х.н.
kalashnikoa.karina@mail.ru

В современном мире как никогда необходимо следить за радиационной обстановкой. Радиационный мониторинг является неотъемлемой частью экологического мониторинга и позволяет отслеживать состояние окружающей среды под воздействием ионизирующего излучения. Данные мероприятия проводятся с целью предупреждения негативного воздействия ионизирующего излучения – излучения, приводящего к образованию ионов разных знаков. Главная задача отслеживания радиационной обстановки на открытых территориях – обеспечение безопасного проживания населения.

В работе гамма-фон (мощность эквивалентной дозы гамма-излучения, МЭД, мкЗв/ч) исследовался в 13 малых и средних городах Ростовской области, приведенных ниже в таблице: А-Азов, АК-Аксай, Б-Батайск, Д-Донецк, ВД-Волгодонск, С-Сальск, НШ-Новошахтинск, Т-Таганрог, НЧ-Новочеркасск, БК-Белая Калитва, КШ-Каменск-Шахтинский, СК-Семикаракорск, Ш-Шахты. Измерения МЭД проводились дозиметрами-радиометрами ДРБП-03 и ДКС-96 с блоком детектирования 96с методом пешеходной гамма-съемки на высоте 100 сантиметров от поверхности земли.

Параметр, мкЗв/ч	А	АК	Б	Д	ВД	С	НШ	Т	НЧ	БК	КШ	СК	Ш
Минимум	0,01	0,01	0,02	0,05	0,01	0,02	0,04	0,01	0,01	0,01	0,02	0,02	0,01
Максимум	0,3	0,51	0,3	0,3	0,4	0,3	0,26	0,24	0,23	0,19	0,22	0,20	0,25
Среднее	0,14	0,13	0,13	0,18	0,1	0,13	0,15	0,14	0,11	0,10	0,12	0,11	0,13
Стандартная ошибка	0,001	0,002	0,0023	0,002	0,001	0,002	0,001	0,002	0,005	0,002	0,002	0,002	0,002
Медиана	0,14	0,14	0,14	0,18	0,1	0,14	0,15	0,15	0,12	0,10	0,12	0,11	0,13
Мода	0,1	0,12	0,18	0,17	0,09	0,18	0,11	0,1	0,07	0,07	0,07	0,05	0,03
Стандартное отклонение	0,04	0,05	0,07	0,04	0,04	0,07	0,04	0,04	0,049	0,05	0,06	0,05	0,07
Дисперсия выборки	0,002	0,003	0,005	0,002	0,001	0,0059	0,002	0,002	0,002	0,003	0,003	0,003	0,005

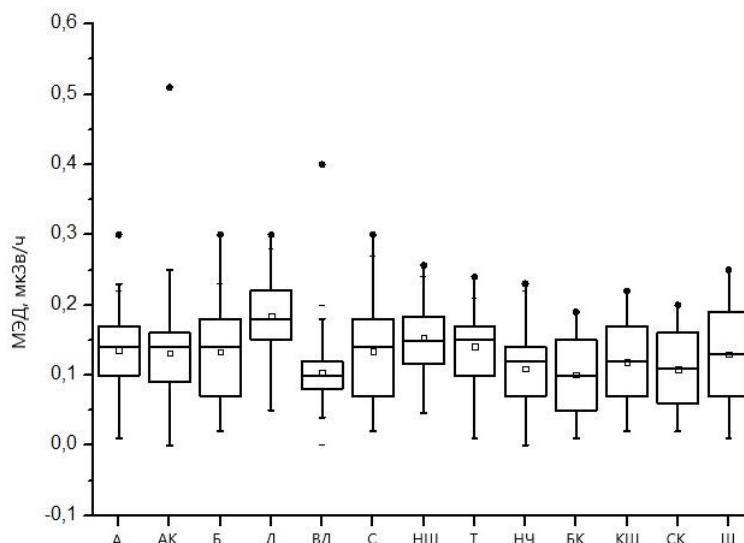


рис.1. Распределение МЭД в малых и средних городах Ростовской области

Как видно из таблицы – максимальная МЭД гамма-излучения зафиксирована в Донецке. Это может быть обусловлено как наличием угольных месторождений в непосредственной близости (добыча угля может сопровождаться повышением радиации за счет выноса на поверхность пород глубокого залегания с повышенным содержанием естественных радионуклидов). Не исключено использование стройматериалов с повышенным содержанием радионуклидов. Также хочется отметить, что в городе Волгодонске прослеживается самое низкое значение МЭД. А это значит, что наличие атомной электростанции не влияет на радиологическую обстановку в Ростовской области.

В целом, значения мощности эквивалентной дозы гамма-излучения сопоставимы с Нормами радиационной безопасности (НРБ-99/2009) и характерны для Ростовской области.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности 2023 г.). Проект № FENW-2023-0010/(Г30110/23-11-ИФ).

Список публикаций:

[1] ТЕ1.415313.003РЭ Дозиметры-радиометры ДКС-96. Паспорт. Руководство по эксплуатации

[2] ГКПС 14. 00.00.000 ПС. Дозиметр-радиометр ДРБП-03 с блоками детектирования БДГ-01 и БДБА-02. Паспорт (Техническое описание, инструкция по эксплуатации, формуляр).

Удельная активность ^{137}Cs в почвах Ростовской области на территориях с различной антропогенной нагрузкой

Маломыжева Наталья Викторовна

Швецова Дарья Алексеевна

Южный федеральный университет

Бураева Елена Анатольевна, к.х.н.

llia.2013@yandex.ru

Почва является одним из важнейших компонентов биосферы, которые обеспечивает существование живых организмов, в том числе и жизнь человека, и растений. Содержание радионуклидов в почвах определяют для оценки радиоактивности окружающей среды [1], определения уровня загрязненности почвенных экосистем [2], в мониторинговых исследованиях объектов в различных странах [3]. Определение радиоактивности почв промышленно-городских (ПГТ) и особо охраняемых природных (ООПТ) территорий необходимо для выявления зон с повышенным уровнем содержания радионуклидов.

Целью данной работы является проведение радиоэкологического исследования почв на промышленно-городских и особо охраняемых природных территориях Ростовской области для выявления зон с повышенным уровнем содержания искусственных радионуклидов в объектах окружающей среды на примере ^{137}Cs .

К ООПТ Ростовской области были отнесены урочища «Черная Балка» и «Каменная Балка», Приазовская заповедная степь, Персиановская заповедная степь, биосферный заповедник «Ростовский». К ПГТ – четыре крупных промышленных города Ростовской области: г. Ростов-на-Дону (РНД), г. Новочеркасск (НВЧ), г. Волгодонск (ВЛД), г. Таганрог (ТГ). Пробы почв отбирались с помощью механических приборов сбора проб и по установленной стандартной схеме. Методики гамма-спектрометрии соответствовали руководству, действующим ГОСТ и методическим указаниям.

В ходе работы, используя непараметрический критерий Колмогорова-Смирнова, было показано, что при уровне значимости 0,05 распределение удельной активности ^{137}Cs на ПГТ и ООПТ не подчиняется нормальному закону (рис.1).

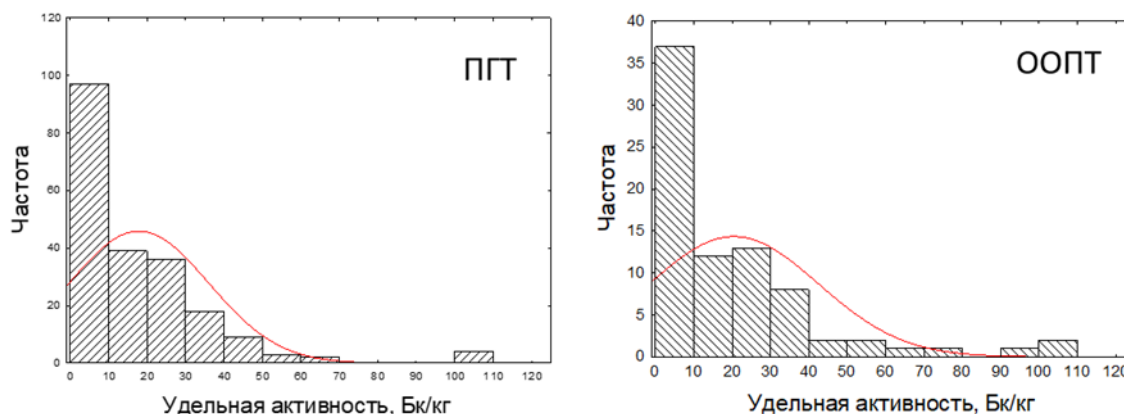


рис.1. Распределение удельной активности ^{137}Cs на территориях Ростовской области с различной степенью антропогенного влияния

В целом данный радионуклид распределен в почвах ПГТ и ООПТ Ростовской области неравномерно вследствие неравномерного выпадения данного радионуклида после аварии на Чернобыльской АЭС. Используя преобразования Бокса-Кокса для статистической обработки данных и проведя анализ на соответствие нормальному закону распределения преобразованных данных удельной активности ^{137}Cs было установлено, что в верхнем слое почв ООПТ и ПГТ Ростовской области средняя удельная активность радиоцезия составляет 12,9 и 11,7 Бк/кг соответственно и являются статистически равными с 95% вероятностью.

Зафиксированные достаточно высокие удельные активности (в 3–10 раз превышающие средние значения) требуют отдельного детального анализа. Наличие участков с повышенными концентрациями радиоцезия не оказывает значимого влияния на радиационную безопасность населения и окружающей среды и не влияет на мощность эквивалентной дозы гамма-излучения на территории Ростовской области [4].

Проведенное радиоэкологическое исследование почв на промышленно-городских и особо охраняемых природных территориях Ростовской области показывает однородное распределение искусственного радионуклида ^{137}Cs в почвах с различной антропогенной нагрузкой.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности 2023 г.). Проект № FENW-2023-0010/(Г30110/23-11-ИФ).

Список публикаций:

- [1] A. Chandrasekaran, R. Ravisankar, G. Senthilkumar, K. Thillaivelavan, B. Dhinakaran, P. Vijayagopal, S.N. Bramha, B. Venkatraman. Spatial distribution and lifetime cancer risk due to gamma radioactivity in Yelagiri Hills, Tamilnadu, India. // *Egyptian journal of basic and applied sciences*. – 2014. – №47. – P. 1–11.
- [2] G. Wallova, N. Kandler, G. Wallner. Monitoring of radionuclides in soil and bone samples from Austria. // *Journal of Environmental Radioactivity*. – 2012. – №107. – P. 44–50.
- [3] A. A. Kolapo, A. Kazeem B. Adeniyi, C. Adejumobi. Determination of natural radioactivity and hazard in soil samples in and around gold mining area in Itagunmodi, south-western, Nigeria. // *Journal of Radiation Research and Applied Sciences*. – 2014. – №7. – P. 249–255.
- [4] Бураева Е.А., Малышевский В.С., Нефедов В.С., Тимченко А.А., Горлачев И.А., Семин Л.В., Шиманская Е.И., Триболина А.Н., Кубрин С.П., Гузлев К.А., Толтыгин И.Е., Мартыненко С.В. Мощность эквивалентной дозы гамма-излучения природных и урбанизированных территорий Северного Кавказа // *Фундаментальные исследования*. 2013. №10 (часть 5). С. 1073–1077.

Использование биолюминесцентных систем для мониторинга воздействия гуминовых веществ на радиоактивные растворы

Медведев Вадим Викторович

Семенова Александра Алексеевна, Соловьёв Влад Сергеевич

Национальный исследовательский Томский политехнический университет

Сачкова Анна Сергеевна, к.б.н.

vvm54@tpu.ru

Загрязнение окружающей среды радиотоксичными соединениями диктует необходимость контроля концентрации этого элемента в природных водах до допустимых пределов [1]. Опасность альфа-излучающего нитрата уранила, как внешнего источника облучения невысока, однако, при попадании внутрь организма, он может вызывать прямые (непосредственно ионизация молекул) и косвенные (радиолиз воды и последующее взаимодействие продуктов радиолиза с клеточными структурами) биоэффекты. Уран в виде ионов уранила практически необратимо связывается с сульфгидрильными группами аминокислотных остатков белков, что приводит к их инактивации. Торий, как химический элемент, может проявлять химическую токсичность, так как является тяжелым металлом, радиационную – как альфа-излучатель, и также, как и уран вносит вклад в естественный фон облучения организмов.

Перспективными биоактивными агентами для снижения токсичности как химической, так и радиационной, являются гуминовые вещества (ГВ).

Биолюминесцентный анализ является не только одним из перспективных экспрессных методов биологического мониторинга водной среды [2], но и методом с помощью которого можно изучать механизмы снижения токсичности поллютантов [3]. В работе использовали люминесцентную систему двух сопряженных реакций, катализируемых ферментами NAD(P)H:FMN-оксидоредуктазой и люциферазой. Данную систему можно назвать моделью живой клетки и косвенно судить о состоянии организма по изменениям параметров.

Было исследовано влияния нитрата уранила и нитрата тория на скорость окисления NADH – восстановителя люминесцентной системы двух сопряженных реакций, катализируемых ферментами NAD(P)H:FMN-оксидоредуктазой и люциферазой, а также исследованы механизмы снижения токсичности растворов U^{238} и Th гуминовыми веществами.

Работа выполнена на спектрофотометрах ПЭ - 5400ВИ ЭКРОС и UVIKON-943 [3]. Проводили измерения скорости окисления NADH в реакционных смесях разного состава при длине волны 340 нм. Порядок реакции считаем псевдопервым. Изменение скорости окисления NADH определяли через отношение изменение концентрации по времени.

Влияние U^{238} на скорость окисления NADH изучали с использованием растворов различного состава. Так добавление растворов нитрата уранила, как в первую, так и во вторую систему приводит к снижению скорости процесса. Скорость автоокисления NADH снизилась в 2 раза (2,65 против 5,31 (моль /л)·мин), а скорость биохимической реакции NADH + FMN в 3,85 раз (2,46 против 9,67 (моль /л)·мин).

Добавление растворов нитрата уранила как к раствору NADH, так и к смеси NADH + FMN приводило к снижению скоростей процессов. Так, скорость автоокисления NADH снизилась в 2,26 раза, а скорость биохимической реакции NADH + FMN в 2,6 раза. Известно, что в роль металла в используемой соли урана выполняет катион уранила $[UO_2]^{2+}$. Ранее, коллегами из Института биофизики СО РАН города Красноярска было показано, что уран приводит к снижению интенсивности биолюминесценции, что свидетельствует о его токсическом воздействии даже при малых концентрациях.

В растворе тория скорость окисления NADH увеличивается в 3,3 и 1,5 раза (в отсутствии и присутствии ГВ, соответственно). Увеличение скорости реакции может быть следствием взаимодействия НАДН с ионами тория и реакцией на ионизацию среды в результате альфа- излучение.

Стоит отметить, что ГВ снижают токсичность раствора урана. Для ГВ снижение токсичности произошло в 1,7 раза. Снижение скорости процесса при добавлении растворов нитрата уранила может быть связано как с радиационными, так и с химическими механизмами токсического воздействия уранил-иона. Снижение токсического эффекта в присутствии ГВ предположительно связано с тем, что ГВ и фуллеренол работают как катализатор внутренних окислительно-восстановительных процессов. Присутствие ГВ снижает влияние и ионов тория на скорость процесса. Причиной может служить связывание тория в комплексы и перепоглощение энергии макромолекулами детоксиканта.

Таким образом, было определено влияние нитрата уранила и тория на скорость биохимических процессов биолюминесцентной системы, катализируемой NAD(P)H:FMN-оксидоредуктазой и люциферазой.

Показана перспективность использования ГВ и $C_{60,70}(OH)_{20-24}$ в качестве детоксикантов растворов нитрата уранила.

Список публикаций:

- [1] Орумо К., Елохин А. П., Ксенофонтов А. И. // *Глобальная ядерная безопасность*. 2020. Т. 35. № 2. С. 16-41.
[2] Безруких А.Е., Есимбекова Е.Н., Кратасюк В.А. // *Journal of Siberian Federal University. Biology*. 2011. Т. 4. № 1. С. 64-72.
[3] Колесник О.В., Рожко Т.В., Лапина М.А., Соловьёв В.С., Сачкова А.С., Кадрьшьева Н.С. // *MDPI. Bioengineering*. 2021. Т. 8. № 194. С. 1–13.

Радиоэкологический мониторинг на территориях городских округов Краснодарского края

Плахотняя Дарья Павловна

Сенин Илья Николаевич, Шульга Всеволод Владимирович

Южный федеральный университет

Бураева Елена Анатольевна, к.х.н.

dplakhotnyaya@bk.ru

Возобновившийся интерес к ядерной энергетике, как источнику энергии с низким уровнем выбросов углерода, вкупе с озабоченностью по поводу прошлых и потенциальных ядерных аварий диктуют, что выяснение воздействия радионуклидов на окружающую среду является глобальной проблемой. Поэтому исходя из полученных результатов, можно будет сделать выводы для районов и условий, которые будут наиболее благоприятны для жизнедеятельности человека.

Краснодарский край имеет достаточно сложную и разнообразную структуру местности: от степных пахотных угодий до высокогорных районов. Ландшафт данного региона, погодные условия и климатические ресурсы позволяют проводить объемные исследования, которые могут показать широкий диапазон значений концентраций радионуклидов и естественного радиационного фона при различных условиях.

Пешеходная гамма-съёмка проводилась в жилых зонах городов: Краснодара, Сочи, Новороссийска, Анапы и Горячего Ключа. Сбор данных гамма-фона проводился дозиметром-радиометром ДКС-96.

По результатам гамма-дозиметрии было установлено, что среднее значение МЭД в г. Анапа составляет 0,11 мкЗв/ч, в г. Краснодар – 0,14 мкЗв/ч, в г. Сочи – 0,12 мкЗв/ч, в г. Новороссийск – 0,10 мкЗв/ч и в г. Горячий Ключ – 0,08 мкЗв/ч. Стоит отметить, что в городе Горячий Ключ МЭД несколько ниже, чем в остальных исследуемых населенных пунктах, что может быть обусловлено тем, что данный городской округ расположен в предгорной местности, что не предполагает возделывание пашен или строительство особо крупных промышленных предприятий.

В целом различные факторы, такие как количество предприятий, географическое расположение самих объектов, особенности рельефа и пр., в настоящее время не оказывают значительного влияния на уровень гамма-фона и не приводят к ухудшению радиоэкологической обстановки территорий.

Мощность эквивалентной дозы гамма-излучения на городских территориях Краснодарского края варьируется в пределах от 0,08 до 0,14 мкЗв/ч, что не превышает допустимый гамма-фон установленный “Нормами радиационной безопасности”[1].

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности 2023 г.). Проект № FENW-2023-0010/(Г30110/23-11-ИФ).

Список публикаций:

- [1] СанПин 2.6.1.2523-09 *Нормы радиационной безопасности (НРБ-99/2009)*. Утверждены и введены в действие постановлением Главного государственного санитарного врача Российской Федерации Г. Г. Онищенко от 7 июля 2009 г № 47 с 01 сентября 2009 г.

Исследование радиационной опасности углей, применяемых в системах твердотопливного отопления в Приморском

Полянский Дмитрий Александрович

Зайкова Юлия Сергеевна

Дальневосточный федеральный университет

polyanskiy.da@dvfu.ru

В последнее время в связи с широким распространением индивидуального жилищного строительства в Приморском крае и применением для отопления данных строений твердотопливных котлов становится актуальным вопрос об уровне радиационной опасности углей и получаемой золы, а также их потенциальном влиянии на проживающих в этих строениях.

Формирование естественной радиоактивности угля происходит при помощи радионуклидов природного происхождения, содержащихся в нем. Это элементы уранового, актиниевого и ториевого рядов, а также долгоживущий высокоактивный радионуклид калий-40. Несмотря на то, что уран в меньшей степени содержится в земной коре, чем торий, он достаточно широко рассеивается, так как в окислительных условиях земной поверхности находится в виде соединений, имеющих высокую растворимость. Известно, что среднее содержание радиоактивных веществ в угле приблизительно совпадает с гранитными кларками. Существуют достаточно значимые различия в концентрации радиоактивных веществ, содержащихся в разных углях. Содержание радионуклидов может быть увеличено из-за внесения урана. Например, уголь, добываемый в Подмоскowie, содержит уран в концентрации примерно 9,15 г/т, а торий – 11,65 г/т. Радиоактивность летучей золы и шлака, которые образуются в результате сгорания этого угля, составляет более 370 Бк/кг (иногда значение радиоактивности достигает 520 Бк/кг). При этом радиоактивность после сжигания углей, месторождением которых является Кузнецкий угольный бассейн, колеблется в пределах 20–40 Бк/кг. По мере выработки месторождения концентрация радионуклидов в угле может меняться.

В работе были исследованы угли, доступные для отопления частных домов в исследуемом районе – двух местных месторождений – Павловское и Липовецкое, двух сибирских – Черногорское (республика Хакасия) и Бородинское (Красноярский край). Сжигание контрольных партий проводилось в котле Dakon DOR 32, дозиметрические и радиометрические исследования исходных углей и продуктов сгорания проводились с помощью радиометра МКС-01СА1М.

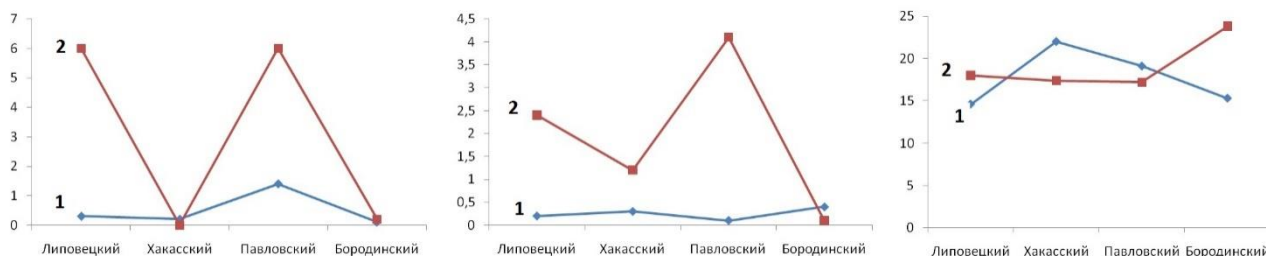


рис. 1. Поток альфа-частиц, $1/\text{см}^2 \cdot \text{мин}$, (а), бета-частиц, $1/\text{см}^2 \cdot \text{мин}$, (б), экспозиционная доза, мкР/ч, (в) от исследуемых углей (1) и продуктов их сгорания (2)

В плане альфа- и бета-активности значимыми оказались показатели продуктов сгорания углей приморских месторождений. Это позволяет предположить наличие в местных углях тяжёлых элементов, являющимися источниками альфа-излучения.

Измерение экспозиционной дозы показало обратную картину. Приморские угли показали значения, близкие для угля и золы, имеющие небольшой разрыв и не превышающие 20 мкР/ч (фон в лаборатории, где проводились измерения, составлял 12 мкР/ч). А вот сибирские дают повод задуматься. Хакасский уголь показал значение экспозиционной дозы более чем на 20% превышающее значение, создаваемое его же золой. Такое возможно в случае, если в нём присутствуют гамма-активные элементы, уносимые с летучей фракцией золы. Уголь Бородинского месторождения, наоборот, показывает значение экспозиционной дозы, создаваемой золой, на 50% большее, чем у исходного угля. Такое возможно, когда гамма-активные изотопы по большей части остаются в тяжёлой, нелетучей фракции золы.

Возможность применения легких водородосодержащих материалов в качестве биологической защиты от нейтронного излучения

Рудников Никита Андреевич

Чуприков Александр Иванович, Кузнецов Михаил Сергеевич, Долматов Олег Юрьевич

Национальный исследовательский Томский политехнический университет

Кузнецов Михаил Сергеевич

nar11@tpu.ru

В настоящее время ядерные технологии, ядерная энергетика приобретают все большую роль в повседневной жизни каждого человека. С развитием данной отрасли возросли и требования к радиационной безопасности человека.

В данной работе представлена возможность применения легких водородосодержащих материалов в качестве биологической защиты от нейтронного излучения.

Для ослабления нейтронного излучения, при помощи полиэтиленовой призмы с Pu-Be источником, были оценены замедляющие способности таких материалов, как: пенополистирол и монтажная пена. Экспериментально полученные транспортные макроскопические сечения монтажной пены составили $0,00057 \text{ см}^{-1}$ для быстрых и $0,015 \text{ см}^{-1}$ для тепловых нейтронов. Макросечение для пенополистирола для тепловых нейтронов составило $0,0036 \text{ см}^{-1}$, замедление быстрых нейтронов в объеме материала не происходит.

В качестве улучшения защитных свойств рассматриваемых материалов было предложено добавление борной кислоты в объем монтажной пены с параллельным увеличением объемной плотности с 25 кг/м^3 до 35 кг/м^3 , по результатам эксперимента замедляющая способность увеличилась в 278 раз для быстрых нейтронов и в 20 раз для тепловых. Помимо этого, были изготовлены более плотные, борированные защитные блоки из пенополиуретана, с объемной плотностью 200 кг/м^3 , транспортное макроскопическое сечение которых составило $0,18 \text{ см}^{-1}$ для быстрых и $0,35 \text{ см}^{-1}$ для тепловых нейтронов.

Для наиболее перспективного материала – пенополиуретана было проведено обоснование по использованию полученного материала, включающее серию экспериментов по определению наличия или отсутствия вторичного гамма-излучения и наведенной активности, так же было выполнено обоснование экономической выгоды применения исследуемого материала. В результате экспериментов наличия вторичного гамма излучения и наведенной активности обнаружено не было. Пример созданного блока из борированного пенополиуретана приведен на *рис. 1*.



рис.1. Пример образца из борированного пенополиуретана

Таким образом, по результатам серий проведенных экспериментов были сделаны выводы о возможности применения борированного пенополиуретана в качестве биологической защиты от нейтронного излучения спектра Pu-Be источника.

Мониторинг радиационной обстановки в зоне наблюдения Ростовской АЭС

Сайфудинов Тимур Каноатшохович
Южный федеральный университет
Бураева Елена Анатольевна, к.х.н.
tima.saufydionv2001@gmail.com

На территории Ростовской области проживает около 4 миллионов человек. Ростовская область благодаря наличию умеренного климата и чернозема является крупным производителем и экспортером сельхозпродукции в другие субъекты Российской Федерации. Однако на ее территории расположены ряд объектов ядерно-топливного цикла, к которым относится Ростовская АЭС (РоАЭС), функционирующая с 2001 года. С 2000 года сотрудниками и студентами Южного федерального университета проводится ежегодный радиационный мониторинг в рамках независимых исследований.

Как правило, распределение гамма-фона на контрольных участках (КУ) зоны наблюдения Ростовской АЭС достаточно равномерное, при этом видно, что оно не имеет строго нормального распределения, также распределение МЭД не подчиняется строго нормальному и логнормальному закону распределению (рис. 1).

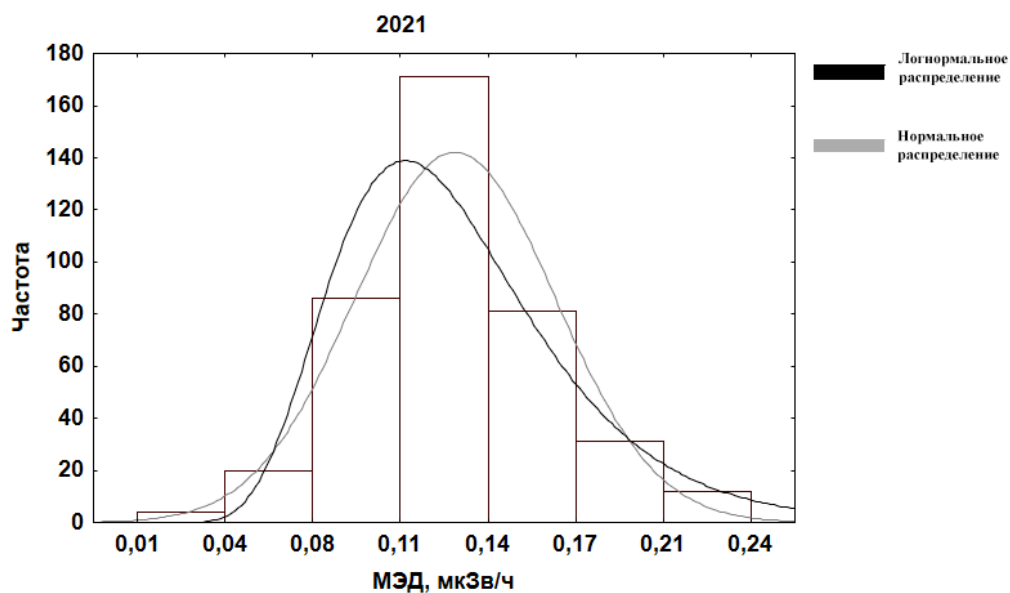


рис. 1. Распределение мощности эквивалентной дозы гамма-излучения на высоте 100 см в 2021 году

Распределение МЭД гамма-излучения в предпусковой год и в 2021 году варьируется в широком диапазоне, но соответствуют Нормам радиационной безопасности (НРБ-99/2009). Следовательно, расположенная в 16 километрах от г. Волгодонска Ростовская АЭС не ухудшает радиоэкологическую обстановку.

Основным источником гамма-фона в почвах являются продукты распада ^{137}Cs . Радиоцезий образовался во время ядерных испытаний и аварии на ЧАЭС, кроме этого, он имеет период полураспада 30,2 г, поэтому с момента начала мониторинга на площадке РоАЭС можно ожидать постепенное понижение фона, что отчетливо видно вследствие распада ^{137}Cs (рис. 2). Это подтверждается не только нашими исследованиями, но и измерениями на пунктах АСКРО, данными НПП Тайфун и сторонними исследованиями.

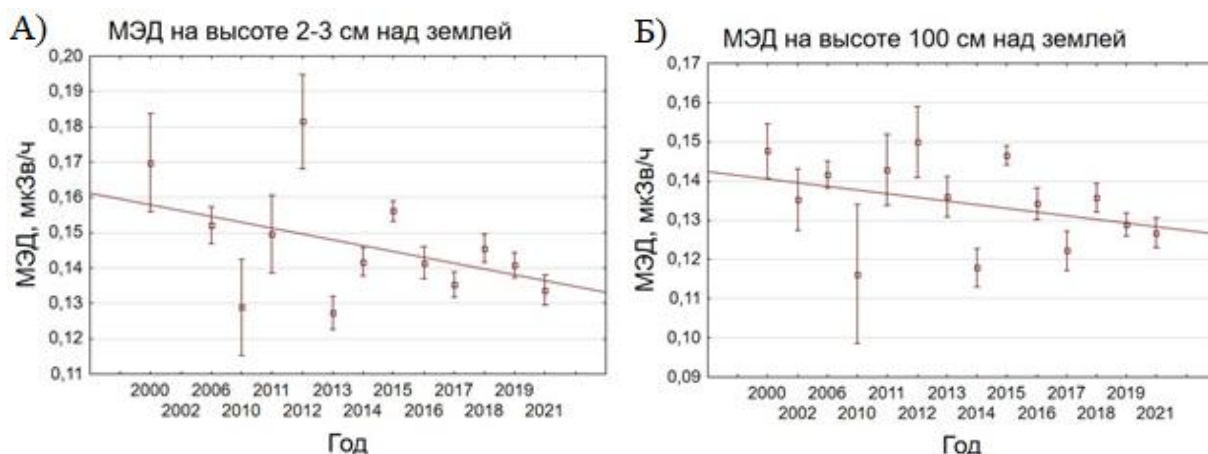


рис. 2. Динамика изменения гамма-фона на высоте 2–3 см и на 100 см

Также было обнаружено, что МЭД на поверхности и на глубинке отличается в среднем на 0,03 мкЗв/ч. Сдвиг обусловлен тем, что концентрация цезия у поверхности больше, чем в глубине, так как цезий способен легко переходить в растворенную форму, в данном случае в состав глины.

Таким образом за весь период мониторинга начиная с 2000 и по 2021 год МЭД не превышает 0,15 мкЗв/ч, так называемый «нулевой фон», определенный в экспедиции 2000 года. Было установлено, что гамма-фон на КУ непрерывно уменьшается, что обусловлено в первую очередь распадом ^{137}Cs . Гамма-фон на всех КУ варьируется в пределах 0,12–0,15 мкЗв/ч. Основным результатом длительного мониторинга зоны наблюдения Ростовской АЭС является подтверждение отсутствия влияния работы АЭС на окружающую среду.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности 2023 г.). Проект № FENW-2023-0010/(Г30110/23-11-ИФ).

Список публикаций:

[1] Анализ результатов радиологического мониторинга в регионе размещения Ленинградской АЭС / В. К. Кузнецов, П.Н. Цыгвинцев, Н.И. Сан-жарова, А. В. Панов // *Радиация и риск.* – 2021. – Т. 30, № 2. – с. 89–100. doi: 10.21870/0131-3878–2021-30-2-89-100

[2] Ежегодник «Радиационная обстановка на территории России и сопредельных государств в 2020 году», Обнинск, 2021

Результаты оценок вертикальной компоненты скорости частиц выбросов промышленных предприятий

Тайлашева Ксения Алексеевна

Покровская Елена Александровна

Томский политехнический университет

Рыжакова Надежда Кирилловна, к.ф.-м.н.

kat14@tpu.ru

Выбросы промышленных предприятий, проходя через системы очистки перед поступлением в атмосферу, не очищаются полностью от мелкодисперсной пыли, содержащей различные химические элементы, в том числе тяжелые металлы. Особая опасность твердых частиц выбросов предприятий заключается в том, что они обладают способностью накапливаться в организме человека и окружающей среде. Тяжелые металлы даже в небольших концентрациях влияют практически на все системы организма, оказывая токсическое, аллергическое, канцерогенное, гонадотропное действие [1, 2]. Известно, что при длительном воздействии серьезную угрозу для здоровья человека даже при малых концентрациях представляют мелкодисперсные частицы сами по себе и особенно в комбинации с тяжелыми металлами и другими загрязнителями. Когда пыль попадает в органы дыхания, наблюдается максимально выраженный токсический эффект тяжелых металлов. Наибольшую опасность представляют субмикронные частицы пыли, которые способны достигать альвеол и адсорбироваться легкими. В связи с этим возникает повышенный интерес к содержанию мелкодисперсных частиц в воздухе.

Для изучения распространения загрязняющих веществ в атмосферном воздухе широко применяется математическое моделирование. Одной из важнейших проблем моделирования является понимание физики

вертикальных перемещений мелкодисперсных частиц в приземном слое атмосферы. Вертикальная компонента скорости частиц выбросов промышленных предприятий определяет дальность их переноса и количество частиц, осевших на поверхность земли. В современных моделях перенос в вертикальном направлении описывается движением частиц в турбулентных потоках с учетом сил гравитации. Совпадение результатов моделирования с экспериментом удастся получить для устойчивых состояний атмосферы [3]. Однако в условиях атмосферной неустойчивости перемещение частиц в вертикальном направлении возможно также в восходящих или нисходящих конвективных потоках.

В работе проведены оценки средних значений вертикальной компоненты скорости мелкодисперсных частиц выбросов угольной ТЭЦ и алюминиевого завода. Необходимо отметить, что твердые частицы выбросов предприятий металлургического и теплоэнергетического цикла содержат тяжелые металлы в больших количествах, представляя угрозу для здоровья человека. Процесс движения частиц неправильной формы в приземном слое турбулентной атмосферы является очень сложным. Следовательно, представляется невозможным построить строгую математическую модель для его описания. В подобных случаях для решения практических задач используют эмпирические или полуэмпирические подходы.

Исследование проведено с помощью разработанного авторами полуэмпирического метода определения скорости перемещения мелкодисперсных частиц в вертикальном направлении [4]. Метод основан на решении обратной задачи переноса – определении параметров аналитического решения стационарного диффузионно-конвективного уравнения для точечного высотного источника по измеренному на высоте 1-2 м от поверхности земли горизонтальному профилю уровня загрязнения.

Выбросы крупных предприятий могут переноситься на расстояния более 10 км. При отдалении от источника загрязнения содержание примеси в атмосферном воздухе уменьшается, поэтому на больших расстояниях от предприятий количество загрязняющих веществ в воздухе будет сравнительно малым. Инструментальные методы измерения концентраций химических элементов в атмосферном воздухе в этом случае непригодны, так как для получения достоверных результатов необходим большой период экспозиции. Измерение горизонтального профиля уровня загрязнения в приземном слое атмосферы проведено с помощью метода мхов-биоиндикаторов, который обеспечивает необходимые времена экспозиции. Метод мхов-биоиндикаторов основан на сравнительном анализе концентраций химических элементов во мхах, отобранных на исследуемой и фоновой территориях, период экспозиции составляет от нескольких недель до нескольких лет.

Для исследования были выбраны Новосибирская ТЭЦ-5 и Красноярский алюминиевый завод (КраЗ). Планшеты с отобранным на условно чистой территории эпифитным мхом *Pylaisia polyantha* (Hedw.) были изготовлены и размещены на деревьях на различных расстояниях от исследуемых объектов. Направление размещения планшетов обусловлено отсутствием других крупных источников загрязнения, а также преимущественным направлением ветра на данной территории и доступностью точек размещения. В зоне влияния Новосибирской ТЭЦ-5 планшеты были размещены в северо-северо-восточном направлении, в зоне влияния Красноярского алюминиевого завода – в северном направлении; период экспозиции составил 8 месяцев.

Концентрации химических элементов, содержащихся в выбросах и накопленных за время экспозиции во мхах, измерены методами нейтронно-активационного анализа и атомно-эмиссионной спектроскопии. Природное содержание химических элементов в используемом виде мха измерено в фоновых образцах, отобранных на расстояниях 50 км и более от населенных территорий. Пробоподготовка мхов-трансплантатов к измерениям была проведена в соответствии с методикой [5].

Список публикаций:

[1] Luo P. и др. // *J. Hazard. Mater.* 2016. Т. 301. С. 504-511.

[2] Steiner S. M. и др. // *J. Appl. Soc. Sci.* 2021. DOI: 10.1177/19367244211001751.

[3] Pan Y., Chamecki M., Isard S. A. // *Boundary-layer Meteorol.* 2013. Т. 146. № 2. С. 235-256.

[4] Рыжакова Н. К. и др. Изучение физики вертикального переноса выбросов промышленных предприятий в приземном слое атмосферы // *Известия высших учебных заведений. Физика.* 2022. Т. 65. № 4. С. 143-149. 2022.

[5] Рыжакова Н. К. и др. Пространственное распределение химических элементов атмосферных выбросов угольной ТЭЦ // *Экология и промышленность России.* 2013. № 1. С. 52-55.

Мониторинг загрязнения от угольной промышленности

Татаринцева Мария Алексеевна

Рогова Наталья Сергеевна, Рыжакова Надежда Кирилловна

Томский политехнический университет

Рогова Наталья Сергеевна

mat30@tpu.ru

Широко используемый в качестве источника энергии уголь сохраняет своё важное значение в энергетике, благодаря большим запасам и относительной дешевизне. Однако, уголь в качестве источника энергии имеет существенный недостаток – выбросы предприятий угольной промышленности и энергетики создают серьёзные риски для окружающей среды и здоровья человека [1,2]. Добыча, складирование угля, а также вскрышных и вмещающих пород, обогащение, переработка и сжигание угля сопровождаются выбросами ядовитых газов и твердых частиц (ТЧ), что приводит к загрязнению окружающей среды, в том числе воздуха.

Высокая опасность загрязнения воздуха субмикронными ТЧ выбросов обусловлена сравнительно высоким содержанием в них тяжелых металлов (ТМ) и других токсичных элементов, обладающих способностью накапливаться в почве, воде, биоте и организме человека, нанося вред его здоровью [3]. Определение ТМ рекомендуется производить в качестве индикаторных показателей степени загрязнения окружающей среды техногенными выбросами.

Многочисленные исследования показывают, что содержание и комбинации химических элементов сильно варьируются в зависимости от типа угля. Однако выявлена общая тенденция – большинство наиболее токсичных элементов (Cd, Pb, Hg, Fe, Cu, Zn, Al, As, Sb, Ti, Br, Zr, Ba, Co, Se) концентрируются в субмикронных частицах со значительным отношением поверхности к объему. Субмикронные частицы оказывают более вредное воздействие, чем супермикронные, поскольку имеют длительное время пребывания в воздухе и высокую вероятность осаждения в легких человека. Несмотря на сильную токсичность и канцерогенность обогащенных тяжелыми металлами субмикронных частиц выбросов предприятий угольной промышленности и энергетики, данных о загрязненности ТМ воздушных бассейнов соответствующих предприятий крайне мало. Во многом это объясняется обширностью территорий влияния крупных предприятий угольной промышленности и, соответственно, малостью концентраций твердых частиц выбросов. Как указано выше, большинством ТМ и других токсичных элементов обогащены субмикронные частицы, имеющие наибольший риск воздействия на окружающую среду и здоровье человека, но плохо улавливаемые фильтрами. Малость концентраций и размеров частиц выбросов приводит к тому, что традиционные инструментальные методы изучения загрязнения воздуха ТМ практически не пригодны.

Для определения уровня загрязнения ТМ атмосферного воздуха селитебных территорий в последние десятилетия развиваются методы биоиндикации. Сравнение содержания поллютантов в биоте фоновых и антропогенно нарушенных местообитаний является основой для качественной и количественной оценки степени загрязнения. Наибольшее распространение получили методы, основанные на использовании мхов и лишайников, обладающих высокими аккумуляционными свойствами и широким распространением в природе.

В подавляющем большинстве работ, посвященных изучению антропогенного загрязнения атмосферного воздуха выбросами угольной (и не только угольной) промышленности, приводятся данные о концентрациях ядовитых газов (SO₂, NO, NO₂, CO, CO₂ и т.п.), пыли и летучей золы [4]. Работ, посвященных изучению загрязнения окружающей среды ТМ и другими токсичными элементами, значительно меньше. Как правило, исследования проводятся в промышленно развитых регионах с последующим определением источников загрязнения – транспорта, промышленных предприятий и энергетики. Объектами исследования на содержание ТМ чаще всего являются почвы и дорожная пыль [5]. При исследовании дорожной пыли в районе добычи угля [6] самые высокие концентрации ТМ обнаружены во фракциях наиболее мелкого размера 1–2 мкм. Изотопные соотношения свинца (²⁰⁶Pb/²⁰⁷Pb, ²⁰⁸Pb/²⁰⁷Pb) указывают на то, что литогенный и антропогенный вклад, связанные с этилированным бензином и промышленными выбросами, являются основными источниками атмосферного загрязнения ТМ атмосферного воздуха за последние 85 лет [7].

В настоящее время Томским политехническим университетом запатентован метод контроля загрязнения атмосферного воздуха тяжелыми металлами и другими токсичными элементами с помощью эпифитного мха Пилезия многоцветковая (*Pyralisia polyantha* (Hedw.) V. S. G.). С помощью данного метода реализуется контроль, обнаружение и оценка изменений качества воздуха, загрязненного субмикронными частицами (плохо улавливаемых фильтрами), которые обогащены большинством ТМ и других токсичных элементов. Данные мероприятия особо необходимы в зонах влияния угольной промышленности, характеризующейся загрязнением атмосферного воздуха на всех стадиях производства.

Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда (проект 23-27-00186).

Список публикаций:

- [1] Kravchenko J., Lyerly H. K. *The impact of coal-powered electrical plants and coal ash impoundments on the health of residential communities* // *North Carolina Medical Journal*. – 2018. – Т. 79. – №. 5. – С. 289-300.
- [2] Шутько, Л. Г. Влияние угледобывающей промышленности Кузбасса на здоровье населения региона / Л. Г. Шутько, Л. Л. Самородова // *Уголь*. – 2021. – № 9(1146). – С. 46-50.
- [3] Янин, Е. П. Особенности воздействия предприятий полупроводниковой промышленности на окружающую среду / Е. П. Янин // *Экологическая экспертиза*. – 2021. – № 3. – С. 4-17.
- [4] Юркова, А. А. Влияние угольной пыли на экологию / А. А. Юркова // *Международный журнал гуманитарных и естественных наук*. – 2020. – № 3-1(42). – С. 11-13.
- [5] Maqbool A. et al. *Bioassessment of heavy metals in wheat crop from soil and dust in a coal mining area* // *Pollution*. – 2019. – Т. 5. – №. 2. – С. 323-337.
- [6] Lanzerstorfer C., Logiewa A. *The upper size limit of the dust samples in road dust heavy metal studies: Benefits of a combined sieving and air classification sample preparation procedure* // *Environmental Pollution*. – 2019. – Т. 245. – С. 1079-1085.
- [7] Long Z. et al. *Contamination, sources and health risk of heavy metals in soil and dust from different functional areas in an industrial city of Panzhihua City, Southwest China* // *Journal of Hazardous Materials*. – 2021. – Т. 420. – С. 126638.

Магнитные системы для осаждения наночастиц из водных сред

Филинкова Марина Сергеевна

Жаков Сергей Васильевич

Институт физики металлов УрО РАН

Медведева Ирина Владимировна

filinkova-ms@yandex.ru

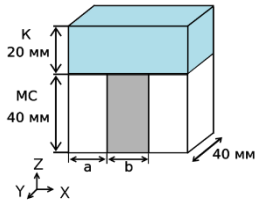
Широкое применение технологий с применением наночастиц приводит к загрязнению окружающей среды токсичными частицами, удаление которых традиционными методами не эффективно [1]. Одной из перспективных технологий безопасной обработки воды для удаления наночастиц является магнитная сепарация [2]. В магнитных сепараторах создается неоднородное магнитное поле, под действием которого от воды можно отделять наночастицы, как магнитные, так и немагнитные при добавлении магнитных флокулянтов. Работа магнитного сепаратора на основе постоянных магнитов, не требует дополнительных энергозатрат на генерацию магнитного поля, что соответствует современным требованиям к «зеленым» природоохранным технологиям. Для эффективного удаления наночастиц в магнитном устройстве должно создаваться градиентное магнитное поле в достаточно большом объеме. Необходима разработка магнитных систем с конфигурациями постоянных магнитов, отвечающим требованиям эффективной магнитной сепарации.

В программе Comsol Multiphysics были численно смоделированы распределения магнитных полей для модельных магнитных сепараторов, состоящих из магнитной системы («МС» на *рис. 1*) и кюветы, содержащей водную суспензию наночастиц («К» на *рис. 1*). Магнитная система состоит из плоских постоянных магнитов NdFeB (BMN 50) (белые элементы на *рис. 1*), чередующихся со вставками из магнитомягкой стали (серые элементы на *рис. 1*). Рассматривались два типа намагничивания постоянных магнитов: Н – вектор магнитной индукции магнита направлен вдоль оси x, V – вектор магнитной индукции магнита направлен вдоль оси z. В моделях варьировались ширина постоянных магнитов и магнитомягких элементов (a и b соответственно). Оценка эффективности магнитного сепаратора проводилась с помощью критерия эффективности γ , равного отношению объема кюветы, в котором наблюдается процесс седиментации:

$$\gamma = V_{\text{eff}}/V. \quad (1)$$

где V – объем всей кюветы, V_{eff} – объем кюветы, в котором значение произведения $Bz \cdot dBz/dz > 4 \text{ T}^2/\text{м}$.

На основании оценки критерия γ установлены оптимальные геометрические размеры магнитного и стального элементов (*табл.*) для системы, состоящей из трех элементов магнит/сталь/магнит. Толщина немагнитного элемента b варьировалась от 0 до 30 мм с шагом 2,5 мм. Влияние толщины магнитного элемента исследовалось в диапазоне 5-30 мм. Показано, что для такой конструкции система V является более эффективной, чем система Н. Эти результаты могут быть использованы для конструирования магнитной системы для лабораторных применений.



Оптимальные значения толщины магнитных и немагнитных элементов и максимальный критерий эффективности, достигаемый при заданных размерах

	x, мм	d, мм	Γ_{\max} , %
H	12,5	10	19
V	30	2,5	31

рис. 1. Схема магнитного сепаратора

Список публикаций:

- [1] Robichaud C.O., Uyar A.E., Darby M.R., Zucker L.G., Wiesner M.R. // *Environ. Sci. Technol.* 2009. № 43 (12). С. 4227-4233.
 [2] Wu X., Gomez-Pastora J., Zborowski M., Chalmers J. // *Sep. Pur. Technol.* 2022. № 280. 119786.

Нейтронно-физический расчёт ВВЭР-1000 с толерантным топливом

Чена Алексей Русланович

Национальный исследовательский Томский политехнический университет

Кузнецов Михаил Сергеевич, к.т.н.

arc3@tpu.ru

Всем ядерным реакторам свойственно остаточное энерговыделение, приводящее в условиях потери охлаждения к перегреву активной зоны. Подавляющее большинство энергетических реакторов использует воду в качестве теплоносителя/замедлителя и циркониевый сплав в качестве материала оболочки тепловыделяющих элементов.

Авария на АЭС Фукусима-1 в марте 2011 года подтвердила опасность пароциркониевой реакции, которая возникает при повышении температуры. После Фукусимы интерес к пароциркониевой реакции и вообще водородной безопасности вновь заметно усилился, хотя исследование проблемы идет с самого рассвета атомной энергетики.

Термин «устойчивое к авариям толерантное топливо» – Accident Tolerant Fuel – (ATF) возник после аварии на Фукусиме. В формулировке МАГАТЭ это топливо должно быть работоспособно как в нормальных условиях работы, так, и это главное – в условиях потери теплоносителя [1].

Моделирование активной зоны реакторной установки производилось при помощи программного обеспечения MCU. Пакет MCU обеспечивает возможность моделирования процессов переноса различных частиц методами Монте-Карло на основе ядерных данных с учётом изменения изотопного состава материалов модели. Модель активной зоны, построенной в MCU, представлена на рис. 1.

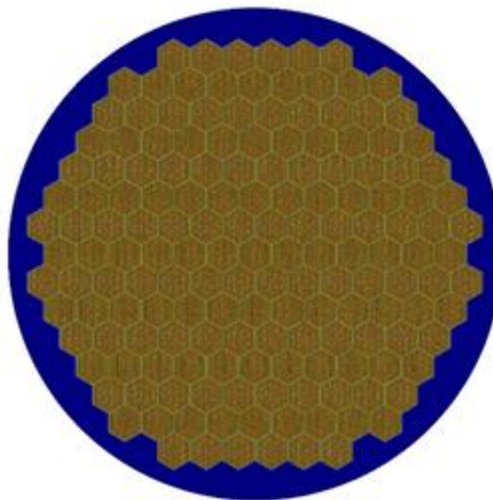


рис.1 Модель активной зоны реактора ВВЭР-1000

В качестве толерантного топлива в расчёте параметров использовалось хромовое покрытие сталью ВХ2К оболочек твэл, выполненных из сплава Э110 и вторым вариантом было использование нержавеющей стали 42ХНМ в качестве оболочки твэл.

Толщина хромового покрытия варьировалась от 10 мкм до 50 мкм. Эффективный коэффициент размножения с ростом толщины хромового покрытия уменьшился с 1,377 до 1,355. Запас реактивности с ростом толщины хромового покрытия уменьшился с 27,35 % до 26,14 %. Длительность кампании с увеличением толщины хромового покрытия уменьшилась с 870 эффективных суток до 810 эффективных суток.

При использовании оболочек твэл, выполненных из нержавеющей стали 42ХНМ получены следующие результаты: эффективный коэффициент размножения равен 1,166, запас реактивности составил 14,16 % и длительность кампании составила примерно 450 эффективных суток.

Таким образом, полученные результаты для стали 42ХНМ оказались заметно хуже, чем полученные результаты для хромового покрытия, но использование 42ХНМ в качестве оболочки твэл позволяет полностью избежать возникновения пароциркониевой реакции.

Список публикаций:

[1] Цимбалист Н. А. Толерантное топливо // Научное сообщество студентов XXI столетия. Естественные науки. – 2019. – с. 27-31.

Распределение мощности эквивалентной дозы гамма-излучения в населённых пунктах Чертковского района Ростовской области

Шаповалов Егор Сергеевич

Шульга Всеволод Владимирович

Южный федеральный университет

Бураева Елена Анатольевна, к.х.н.

yegor.shapovalov.01@mail.ru

Оценка особенности распределения мощности эквивалентной дозы гамма-излучения (МЭД, мкЗв/ч) на территориях является наиболее важным аспектом в исследовании окружающей среды. По его результатам можно судить о радиэкологической ситуации в населённых пунктах и за их пределами и прогнозировать влияние радиации на организм человека. С каждым годом радиационная обстановка исследуется всё более тщательно не только в крупных городах, но и в малонаселённых пунктах вне зависимости от их деятельности, начиная с сельского хозяйства и заканчивая промышленным производством [1-3].

Объектом исследования данной работы является Чертковский район Ростовской области. Измерения проводились в 7 населённых пунктах. Район находится в зоне умеренно-континентального климата, с засушливым, жарким летом и холодной зимой, основная доля осадков приходится на весну и осень. Преобладает равнинная местность, распространены чернозёмные почвы. Из полезных ископаемых добываются глина, песок, камень, щебень. Среднемесячная температура в летний период изменяется от +20°C до +40°C, в зимний период от -25°C до +5°C. Основная деятельность территории исследования связана с обработкой земли и животноводством.

Работа посвящена оценке распределения мощности эквивалентной дозы гамма-излучения (МЭД, мкЗв/ч) методами пешеходной гамма-съёмки, проводимой на высоте 100 см от поверхности в населённых пунктах Чертковского района Ростовской области: х. Сетраки, с. Греково-Степановка, с. Кутейниково, х. Малая Лозовка, х. Арбузовка и с. Алексеево-Лозовское. Использовались дозиметры-радиометры СРП-88 и ДКС-96 с блоком детектирования БДКС-96с.

Выше представлены особенности распределения МЭД гамма-излучения как по Чертковскому району (рис. 1), так и в отдельных населённых пунктах (рис. 2). Минимальное, максимальное и среднее арифметическое значения МЭД составляют 0,02 мкЗв/ч, 0,28 мкЗв/ч и 0,13 мкЗв/ч соответственно. В целом МЭД подчиняется нормальному закону распределения и не превышает значений, рекомендованных Нормами радиационной безопасности (НРБ-99/2009). Гамма-фон в исследуемых селах однороден, радиоактивных аномалий не выявлено.

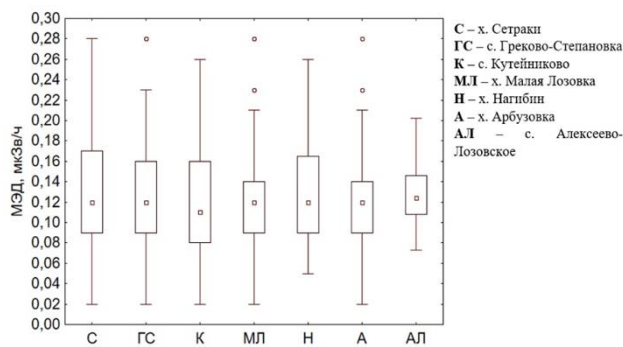
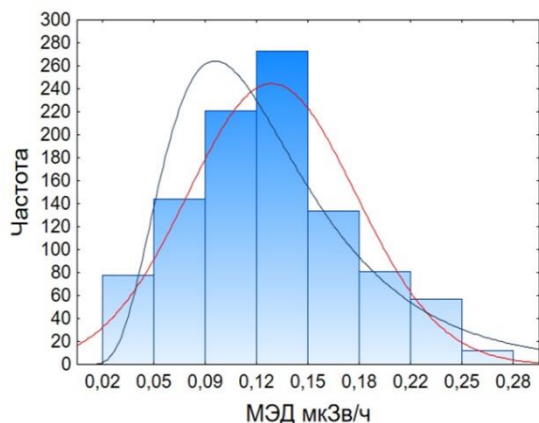


рис. 1. МЭД на территории Чертковского района рис. 2. Сравнительный анализ МЭД населённых пунктов

Сравнительный анализ МЭД в каждом из населённых пунктов (рис. 2) показал, что значимые различия в значениях гамма-фона в сельских поселениях Чертковского района Ростовской области отсутствуют. Во всех населённых пунктах достаточно слабо развита дорожная инфраструктура, отсутствуют промышленные предприятия, месторождения полезных ископаемых и другие факторы, которые могут оказать влияние на гамма-фон.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности 2023 г.). Проект № FENW-2023-0010/(Г30110/23-11-ИФ).

Список публикаций:

- [1] Linnea E. *Environmental Radiation*. Wahl, Lawrence Berkeley National Laboratory/ Health Physics Society Specialists in Radiation Safety, 2010.
- [2] *Radiation in the Environment. Nuclear Science—A Guide to the Nuclear Science Wall Chart* ©2018 Contemporary Physics Education Project (CPEP). Chapter 15.
- [3] Шершаков В.М., Булгаков В.Г., Крышев И.И., Вакуловский С.М., Каткова М.Н., Крышев А.И. *Радиационная обстановка на территории России и сопредельных государств*. Федеральное государственное бюджетное учреждение «Научно-Производственное Объединение «Тайфун», 2017.
- [4] Бураева Е.А., Мальшевский В.С., Нефедов В.С., Тимченко А.А., Горлачев И.А., Семин Л.В., Шиманская Е.И., Триболина А.Н., Кубрин С.П., Гуглев К.А., Толыгин И.Е., Мартыненко С.В. *Уровень эквивалентной дозы гамма-излучения природных и урбанизированных территорий северного Кавказа // Фундаментальные исследования*. – 2013. – № 10-5. – С. 1073-1077.
- [5] СанПин 2.6.1.2523–09 *Нормы радиационной безопасности (НРБ–99/2009)*. Утверждены и введены в действие постановлением Главного государственного санитарного врача Российской Федерации Г.Г. Онищенко от 7 июля 2009 г. № 47 с 01 сентября 2009 г.

Сравнительная характеристика поверхностного распределения радионуклидов в зоне чернозёмных почв природных, природно-техногенных и урбанизированных территорий Ростовской области

Швецова Дарья Алексеевна

Маломыжева Наталья Викторовна, Джюра Кирилл Олегович

Южный федеральный университет

Бураева Елена Анатольевна, к.х.н.

Dashik.shvet@yandex.ru

Географически Ростовская область расположена на юге Европейской России в зоне Южно-Русской равнины, сливающейся своей южной частью с Предкавказскими равнинными степями. Преобладающими почвами Ростовской области являются черноземы (62%) и каштановые почвы (23%) [1]. В отличие от каштановых почв черноземы имеют более мощный гумусовый горизонт и содержат больший процент гумуса.

В чернозёмной почвенной зоне Ростовской области находятся следующие особо охраняемые природные территории: Персиановская заповедная степь, Приазовская степь (хут. Недвиговка), Ботанический сад, Черная балка. Эти территории были выбраны для описания естественных почв, поскольку эти природные комплексы

наименее подвержены антропогенному воздействию. В качестве природно-техногенных территорий Ростовской области были выбраны: Новочеркасская ГРЭС и предприятие по обращению с радиоактивными отходами ФГУП «РосРАО». Радиационная обстановка данных территорий обусловлена не только естественной радиоактивностью окружающей среды, но постоянным воздействием промышленных предприятий. Для изучения урбанизированных территорий были выбраны почвы города Ростова-на-Дону, который является административным центром Ростовской области и Южного федерального округа России. Имеет статус города-миллионника и является крупным административным, экономическим, культурным, научным, образовательным, промышленным центром и важнейшим транспортным узлом на Юге России.

Целью данной работы является анализ и сравнение поверхностного распределения естественных и искусственных радионуклидов в черноземных почвах урбанизированных, природных и природно-техногенных территорий Ростовской области.

При анализе проб почвы на различные гамма-излучатели естественного происхождения (^{40}K , ^{226}Ra и ^{232}Th) и на ^{137}Cs , имеющий антропогенное происхождение, была проведена сравнительная характеристика распределения радионуклидов по поверхности почвы.

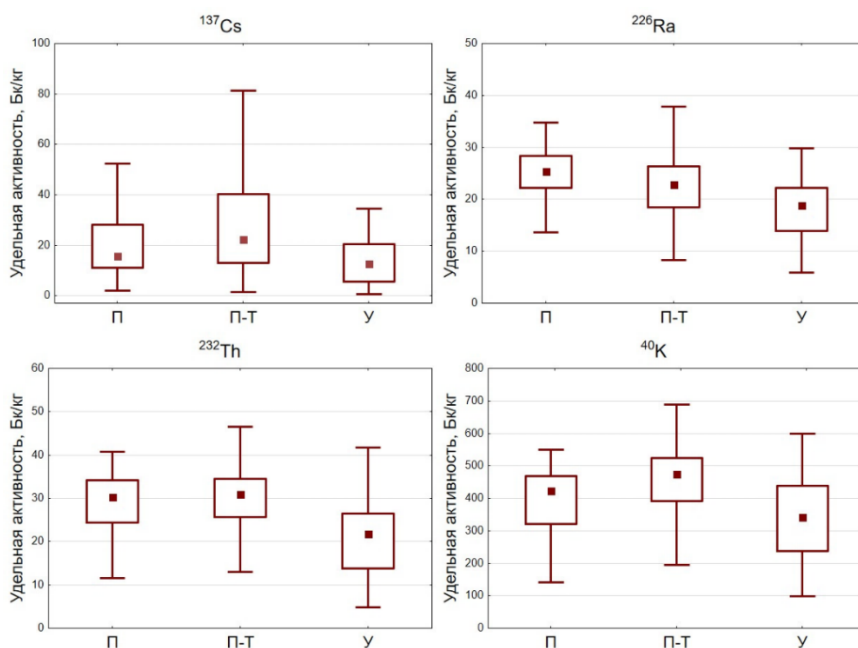


рис.1. Разброс значений удельной активности радионуклидов в почвах природных (П), природно-техногенных (П-Т) и урбанизированных (У) территорий

Анализ рис. 1 показал, что наибольший разброс значений удельной активности ^{137}Cs наблюдается в почвах природно-техногенных территорий, а наименьший – урбанизированных. Значения медианы указаны по возрастанию: урбанизированные (12,60 Бк/кг), природные (15,67 Бк/кг), природно-техногенные (22,29 Бк/кг).

При изучении естественных радионуклидов можно заметить, что наименьшие значения удельной активности относятся к урбанизированным территориям. Для ^{226}Ra средние значения, указанные по возрастанию: урбанизированные (18,80 Бк/кг), природно-техногенные (22,91 Бк/кг), природные (25,35 Бк/кг). Для ^{232}Th средние значения, указанные по возрастанию: урбанизированные (21,75 Бк/кг), природные (30,35 Бк/кг), природно-техногенные (31,02 Бк/кг). Для ^{40}K средние значения, указанные по возрастанию: урбанизированные (342,25 Бк/кг), природные (423 Бк/кг), природно-техногенные (475 Бк/кг).

В ходе изучения характера распределения естественных ^{40}K , ^{226}Ra и ^{232}Th и ^{137}Cs , имеющего техногенное происхождение, в верхнем слое почвы исследуемых территорий установлено, что удельная активность радионуклидов в почвенных образцах в основном соответствует среднемировым значениям и характерна для Ростовской области и г. Ростова-на-Дону.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности 2023 г.). Проект № FENW-2023-0010/(Г30110/23-11-ИФ).

Список публикаций:

[1] Национальный атлас почв Российской Федерации. – М. Астрель: АСТ, 2011. – 632 с

Оценка содержания радона в помещениях корпуса «Е» ДВФУ и выработка рекомендаций по снижению его влияния на организм

Штыфлюк Мария Евгеньевна¹

Полянский Дмитрий Александрович²

¹Московский областной научно-исследовательский клинический институт им.

М.Ф.Владимирского, ²Дальневосточный федеральный университет

Полянский Дмитрий Александрович, к.ф.-м.н.

shtyfliuk.me@students.dvfu.ru

Около 59% дозовой нагрузки, получаемой человеком от естественных источников ионизирующего облучения (ИИ), приходится на радон и дочерние продукты его распада (ДПР) за счет внутреннего облучения при ингаляционном пути поступления в организм. С точки зрения радиационной гигиены значимыми являются два изотопа радона – ²²²Rn (радон, член радиоактивного семейства урана-радия) и ²²⁰Rn (торон, член радиоактивного семейства тория). Поступая в здание через грунт, строительные материалы, воду и т.п. радон может накапливаться в нем, что особенно важно для зданий с длительным пребыванием людей и нестабильным воздухообменом. Биологические эффекты радона обусловлены главным образом канцерогенным действием его альфа-излучения. По данным ВОЗ радон вызывает от 3% до 14% всех случаев рака лёгких, а в синергии с курением канцерогенный риск возрастает в 25 раз [4]. Т.о. важность радонового контроля зданий на всех этапах их строительства трудно переоценить. Приморский край входит в группу областей с потенциально повышенной радоновой опасностью. Кроме того, регион характеризуется умеренной сейсмичностью и на его территории располагаются геологические разломы, которые потенциально могут способствовать эксхалляции радона из грунта.

В данной работе в соответствии с [1,2,3] было проведено исследование содержания радона в помещениях учебного корпуса «Е» Дальневосточного Федерального Университета (690922, Приморский край, г. Владивосток, о. Русский, пос. Аякс, 10). На каждом уровне всех отсеков корпуса было выбрано по две точки исследования – коридор и туалет (выдержка с открытым смесителем 3 минуты). В течение марта-апреля 2022 года в этих точках проводились измерения эквивалентной равновесной объёмной активности (ЭРОА) радона и торона с целью оценки уровней облучения. Исследование проводилось с учетом погодных условий краткосрочным методом. Затем были проведены расчёты среднегодовых значений ЭРОА изотопов радона (Бк/м³). На основе полученных данных были построены графики зависимости ЭРОА радона в выбранных точках исследования (коридор, туалет) от уровня по каждому из отсеков.

Среднее значение ЭРОА радона в корпусе составило около 29 Бк/м³ при среднемировых наиболее вероятных значениях данного показателя в помещениях зданий – 15 Бк/м³ [3]. Самое высокое значение в 199 Бк/м³ было зафиксировано в туалете 8 отсека на 7 уровне (рис.1), относительно высокое значение 134 Бк/м³ было зарегистрировано на 5 уровне 6 отсека. Кроме того, на фоне стабильно низких значений наблюдались резкие локальные подъемы ЭРОА радона, преимущественно на верхних этажах здания, по-видимому, связанные с выделением радона из строительных материалов. Так в коридоре на 4 уровне 4 отсека ЭРОА составило 11 Бк/м³, тогда как в коридоре того же отсека на 6 уровне эта величина достигала 90 Бк/м³. За счёт таких локальных подъёмов уровня ЭРОА в отдельные дни верхняя граница рассчитанных среднегодовых значений ЭРОА изотопов радона достигла 216 Бк/м³. Вклад торона оказался незначительным.

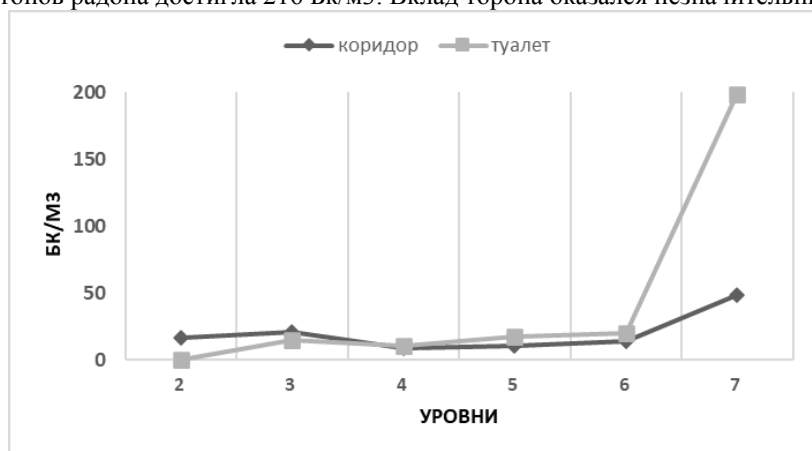


рис.1. ЭРОА радона в помещениях 8 отсека корпуса «Е» ДВФУ

Значимых несоответствий контрольным уровням ЭРОА выявлено не было, однако в зонах локального увеличения ЭРОА изотопов радона необходимо проводить дополнительные исследования, предпочтительно

средне- или долгосрочными методами. Если в ходе дополнительных исследований будет выявлено превышение предельно допустимого уровня ЭРОА, необходимо обеспечить должный воздухообмен и использовать радононепроницаемые покрытия в потенциально опасных помещениях, а также провести санитарно-просветительную работу среди лиц, находящихся в данном корпусе длительное время (сотрудники и студенты), о рисках связанных с воздействием радона и возможных профилактических мероприятиях, в том числе средствах фармакологической поддержки организма (антиоксиданты, иммуностимулирующие средства), а также о вреде табакокурения.

Список публикаций:

[1] СанПиН 2.6.1.2523-09. «Нормы радиационной безопасности (НРБ-99/2009)». Утверждены постановлением Главного государственного санитарного врача Российской Федерации от 07 июля 2009 г. № 47.

[2] МУ 2.6.1.2838-11. Радиационный контроль и санитарно-эпидемиологическая оценка жилых, общественных и производственных зданий и сооружений после окончания их строительства, капитального ремонта, реконструкции по показателям радиационной безопасности. 2011.

[3] МУ 2.6.1.037–2015. Определение среднегодовых значений ЭРОА изотопов радона в воздухе помещений по результатам измерений разной длительности. 2016.

[4] Риск возникновения рака легкого при облучении радоном и продуктами его распада. Заявление по радону/ под ред. М.В. Жуковского, С.М. Киселева, А.Т. Губина // Перевод публикации 115 МКРЗ. Москва: Изд-во «ФГБУ ГНЦ ФМБЦ им. А.И. Бунакина ФМБА России», 2013. – 92 с.

Мощность эквивалентной дозы в рабочих и жилых помещениях ст. Староминской Краснодарского края

Шульга Всеволод Владимирович

Шаповалов Егор Сергеевич, Плахотняя Дарья Павловна, Маломыжева Наталья Викторовна

Южный федеральный университет

Бураева Елена Анатольевна, к.х.н.

ssevashulga@mail.ru

Объектом исследования выступает приземный слой воздуха в станции Староминской Краснодарского края. Этот участок местности имеет равнинно-холмистый тип рельефа. Климат умеренно-континентальный, с мягкой зимой и жарким сухим летом с большим количеством солнечных дней. Среднемесячная температура в зимний период колеблется от -10°C до $+5^{\circ}\text{C}$, в летний период от $+15^{\circ}\text{C}$ до $+35^{\circ}\text{C}$. Предприятия, влияющие на радиационный фон, отсутствуют.

Работа посвящена изучению гамма-фона (мощности эквивалентной дозы гамма-излучения; МЭД, мкЗв/ч) в рабочих помещениях и частных домовладениях ст. Староминской. Гамма-фон измеряли в организациях: МБУК «РДКС», МКУК «СДК Большевик», «СДК Кавказ», а также по адресам домовладений: Щорса 85, Орджоникидзе 5, Красная 51а, Западная 81, Красная 33 кв 2, Калинина 2, Краснознаменная 128, Вокзальная 57, Новодеревянковская 114. Измерения проводились дозиметрами-радиометрами ДКС-96 и СРП-88 на высоте 100 см от поверхности почвы (грунта). Особенности распределения МЭД в ст. Староминской приведены на *рис. 1* и в таблице.

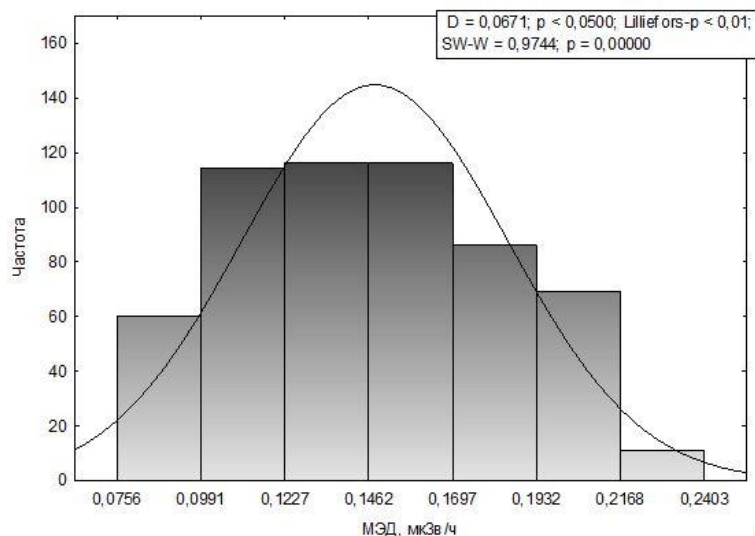


рис. 1. Распределение мощности эквивалентной зоны в помещениях ст. Староминской

Результаты статистической обработки распределения МЭД в помещениях

Минимум, мкЗв/ч	0,076
Максимум, мкЗв/ч	0,24
Среднее арифметическое, мкЗв/ч	0,15
Мода, мкЗв/ч	0,16
Медиана, мкЗв/ч	0,15
Количество измерений	572

Видно, что полученное распределение гамма-излучения в помещениях слабо описывается предельным законом распределения Гаусса. Также критерий проверки на нормальность Колмогорова-Смирнова говорит о том, что эмпирическое распределение далеко от теоретического распределения Гаусса. Это вполне можно объяснить тем, что материал, из которого построены здания содержит естественные и искусственные радионуклиды, которые вносят значительный вклад в МЭД гамма-излучения. Также не следует забывать об эманации радона с поверхности почвы, который может накапливаться в нижних этажах помещений, вследствие чего продукты распада этого опасного газа могут также вносить вклад в гамма-фон. Тем не менее, полученные данные, а именно: среднее арифметическое, мода и медиана в пределах доверительного интервала совпадают, и при том не превышают предельно допустимые значения (0,3 мкЗв/ч) МЭД гамма-излучения, установленные Нормами радиационной безопасности (НРБ-99/2009).

Также о безопасности радиационного фона можно судить по данным представленным в статье [2], в которой указано, что среднее значение урбанизированных территорий Краснодарского края равно 0,16 мкЗв/ч, что вполне согласуется с полученными в работе данными.

Можно сделать заключение о том, что радиационная обстановка помещений станции Староминской находится в пределах допустимых значений, регламентируемых НРБ-99/2009. Следовательно, нет никакой угрозы безопасности здоровья человека.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности 2023 г.). Проект № FENW-2023-0010/(Г30110/23-11-ИФ)

Список публикаций:

- [1] СанПин 2.6.1.2523–09 Нормы радиационной безопасности (НРБ–99/2009). Утверждены и введены в действие постановлением Главного государственного санитарного врача Российской Федерации Г.Г. Онищенко от 7 июля 2009 г № 47 с 01 сентября 2009 г.
- [2]. Буряева Е.А., Мальшевский В.С., Нефедов В.С., Тимченко А.А., Горлачев И.А., Семин Л.В., Шиманская Е.И., Триболина А.Н., Кубрин С.П., Гулев К.А., Толтыгин И.Е., Мартыненко С.В. Мощность эквивалентной дозы гамма-излучения природных и урбанизированных территорий северного Кавказа // *Фундаментальные исследования*. – 2013. – № 10-5. – С. 1073-1077.

21 - Проблемы и методологии преподавания физики. История физики и техники

Воробьев Максим Олегович, учитель физики и математики
Котовск, школа № 3 г. Котовска Тамбовской области, Институт математики физики и информатики
Особенности преподавания физики в разные исторические периоды
e-mail: vorob--yov@mail.ru стр. 320

Ковалёва Анастасия Романовна, магистрант 1 года обучения
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
Эксперименты в школе и дома
Мастропас Зинаида Петровна, к.ф.-м.н.
e-mail: anastasya.Covaleova2015@yandex.ru стр. 322

Нерода Александр Андреевич, аспирант 2 года обучения
Томск, Томский политехнический университет, Инженерная школа ядерных технологий
Формирование инженерного мышления: методологические аспекты
Ларионов Виталий Васильевич, д.п.н.
e-mail: Neroda_94@mail.ru стр. 323

Особенности преподавания физики в разные исторические периоды

Воробьев Максим Олегович

МБОУ СОШ №3 с УИОП г. Котовска

vorob--yov@mail.ru

На сегодняшний день система образования претерпевает множественные поправки. Грядущие изменения коснутся и школьников, и студентов. В основе идеи — формирование собственного стандарта образования с оглядкой на советские традиции. На базе учебных заведений появляются молодежные движения, очень похожие на пионерскую организацию в СССР. В этом году по решению правительства было заявлено о выходе из Болонской системы, т.е. российские вузы откажутся от бакалавриата и магистратуры и вернуться к традиционным специалитетам. В связи с этим нам стоит ещё раз пересмотреть все ценности преподавания предметов советской школы, в том числе методiku преподавания физики. Нельзя не отметить, что в советском союзе наша страна была на первом месте во всех отраслях науки и техники, и все это благодаря той самой советской физической школе. Поэтому в условиях сегодняшней модернизации системы образования стоит пересмотреть успешный опыт советской системы и взять из нее самые лучшие и применимые в современных условиях практики.

Вот как отзывались от Игоре Васильевиче Курчатове студенты, у которых он читал курс физики диэлектриков на инженерно-физическом факультете Ленинградского политехнического института: «Блестящий лектор. Он в полной мере владел искусством преподавать физический смысл каждого излагаемого вопроса и пользовался большой любовью и авторитетом среди учащейся молодежи. Он прямо на лекциях увлеченно рассказывал о новых результатах своих исследований, пробуждал к молодежи серьезный интерес к науке. Постоянно бодрый, веселый, оптимистично настроенный, он умел увлечь коллектив на решение поставленной задачи, показывая своей личной работой пример самоотверженного служения науке и Родине». Не менее теплые высказывания студентов были об Л.Д. Ландау, П.Л. Капице и других советских физиках, преподававших в университетах советского союза. [1]

Служение родине — основной посыл советской школы, это то, чего не хватает современному образованию. Далеко не все сегодняшние школьники понимают, где им пригодятся приобретенные в школе умения и навыки. Как правило, старшеклассники выбирают для себя несколько школьных предметов по которым собираются сдавать выпускные экзамены, совершенно игнорируя изучение остальной школьной программы. Учителя, с пониманием относятся к этим реальностям, входят в положение и стараются не нагружать тех учеников, которые будут сдавать другой предмет по выбору. Это по мнению многих экспертов является серьезной проблемой современного школьного обучения. [2]

В советской школе главной целью было воспитание цельной, разносторонне развитой личности, гармонично сочетающей в себе энциклопедические знания по всем предметам школьной программы, уважение к себе и своим близким, патриотизм, гордость за свою страну и любовь к родине. Покидая школу, ученик имел прекрасные знания по всем школьным предметам, которые открывали ему двери в любой ВУЗ страны.

Рассмотрим некоторые существенные различия советской школы с современным образованием. В Союзе преподавание предметов было четко синхронизировано, темы, проходимые по математике, перекликались с физикой, химией и другими предметами. В советских школах очень приветствовалась система взаимовыручки. Отличники всегда помогали слабым ученикам. Наличие в классе двоечников, это позор всего класса, а не отдельно взятого ученика. Для юных пионеров были обязательными внеурочные занятия, кружки и секции, поэтому ученики не имели возможности бездельничать, в то же время дополнительные занятия мотивировали интерес к дальнейшему обучению. Советский педагог — это человек, на которого хочется быть похожим. К учителям относились с большим уважением, работать учителем считалось почетно. [3]

Из воспоминаний П. Л. Капицы о своей работе с Резерфордом в Кембридже: «Однажды к профессору пришел молодой ученый, окончивший университет и задал вопрос: «Вот я закончил кандидатскую работу, что мне делать дальше?» На что профессор ответил: «Бросить заниматься наукой! Если Вы после кандидатской работы сами не знаете, что Вам делать дальше, значит ученого из Вас не выйдет!». Советская школа физики была направлена прежде всего на самостоятельное мышление. Полноценно развивать самостоятельный подход при обдумывании любой задачи, но не зазубривание, главная цель решения — понимание, и выбор оптимального получения результата. [4]

Нельзя не отметить советские требования к написаниям студентами конспектов на лекциях. В современных школах и ВУЗах учащиеся заменяют технику написания конспекта фотографированием написанной на доске информации на смартфон, ограничивая себя в объеме полученной информации и качестве ее усвоения. Не случайно советское образование со школьной скамьи обучало записывать за

учителем вначале под диктовку, затем составлять конспекты по параграфам, писать изложения и наконец в ВУЗе советский студент умел быстро записывать основные мысли преподавателя во время лекции, делать короткие сокращенные записи, из которых формировался рабочий конспект, по которому можно было воспроизвести материал. [5]

Основная идея конспектирования заключается в том, что при написании конспекта работают гораздо больше отделов мозга чем при обычном списывании, или просмотра фото со смартфона. Как следствие конспектирование за говорящим лектором формирует больше образов и ассоциаций по излагаемому материалу, что приводит к лучшему запоминанию и пониманию. Также постепенное изложение информации в конспекте приводит к запоминанию логической последовательности новых знаний, в которой участвуют самые разные пласты нейронов головного мозга - зрительные отделы, слуховые, образное мышление и т.д. на основании чего ученик, который воспроизводит информацию на лекции по своему конспекту, гораздо лучше усвоит изучаемый материал, чем ученик, фотографирующий доску на телефон. Не случайно в крупных китайских компаниях экзаменами на высокопоставленные должности являются каллиграфия и стихосложение. [6]

В заключении нельзя не отметить ещё один яркий положительный опыт из прошлого столетия – здоровье сберегающие технологии по системе В. Ф. Базарного. [7] Это тридцатилетние научно-фундаментальные исследования ученых, доказывающих негативное воздействие современной системы образования на качество развития и здоровье детей. Система здоровьесберегающей технологии «раскрепощенного развития детей» основана на принципах динамической смены поз – обучение стоя за «конторками», в течении урока два три раза происходит смена положения сидя за партой на положение стоя за конторкой (высоким столом). Также в данную технологию входят офтальмологические тренажеры, использование ковриков для ног при чем резина и линолеум недопустимы, вместо них применяется ткань с нашитыми сверху пуговицами разных размеров или небольшие шарики из дерева. В итоге стоимость оборудования необходимого для здоровьесберегающего класса не превышает комплектации обычного класса в школе. В 80-х годах родители сами делали конторки для своих детей, а дети сами нашивали пуговицы на ткань и делали коврики.

Главными результатами применения здоровьесберегающего обучения стало значительное влияние на сохранение и укрепление здоровья детей. Все дети обучающиеся по данным рекомендациям оказались гораздо сильнее по многим показателям как умственного, так и физического развития. [7,8] Поэтому, принимая все самое лучшее из того что было сделано для детей в советском союзе, будет весьма не лишним ещё раз пересмотреть уже имеющиеся рекомендации, проанализировать приведенные данные положительной динамики развития здоровья и усвоения знаний, и ввести для начала в качестве пробной, а затем и основной предложенную систему обучения, которая не требует больших финансовых вложений и материальных затрат.

Список публикаций:

- [1] Нехорошев Ю. С., Попов В. К., Смирнов Ю. Н. «Игорь Васильевич Курчатов в воспоминаниях и документах» - М. ИздАТ, 2004. – 718 с.
- [2] Землянко А. В. Единый государственный экзамен: Достоинства и недостатки /А.В. Землянко, В.И. Выборнов, Л. Н. Шенцева, - // Молодой ученый. – 2015. - №7.3 (87.3) – с. 24 – 25.
- [3] https://pikabu.ru/story/vyishee_obrazovanie_v_ssr_i_seychas_5430570?utm_source=linkshare&utm_medium=sharing
- [4] Капица П.Л., Ландау Л.Д., Физические основы механики (Как изучали физику на ФТФ МГУ в 1947 году) - под редакцией Б. С. Булыгин М: МФТИ 2017 г. 219 с.
- [5] Румбеишта Е. А. Курс лекций по теории и методике обучения физики в средней школе: Учебное пособие для студентов педагогических ВУЗов; Е. А. Румбеишта – Томск: Издательство Томского государственного политехнического университета, 2016 г. – 144 с.
- [6] Савельев С.В., материалы лекции «Каллиграфия и мозг» © <https://www.livemaster.ru/topic/3066263-kalligrafiya-i-mozg?ysclid=lfq4тбреи5937315318>
- [7] Базарный В. Ф. Дитя человеческого. Психофизиология развития и регресса. – М: 2009. – 328 с.
- [8] Коробейников А. А. Актуальная европейская проблема: внедрение здоровьесберегающей педагогики: - М: 2009. – 264 с.

Эксперименты в школе и дома
Ковалёва Анастасия Романовна
Южный федеральный университет
Маспронас Зинаида Петровна, к.ф.-м.н.
anastasya.Covaleova2015@yandex.ru

Познание начинается с удивления, а продолжается в конкретной деятельности. Обучать – значит постоянно использовать приемы, стимулирующие самостоятельный поиск, с помощью которого школьник находит, открывает для себя новые знания. Такой поиск учитель физики может организовать практически на любом уроке, используя фронтальные опыты и индивидуальные экспериментальные задания. Фронтальный эксперимент, как никакой другой, позволяет в полной мере сочетать разные методы обучения. Именно в процессе выполнения фронтальных экспериментов у школьника появляется внутренняя мотивация при поиске решения поставленной проблемы.

В последнее время, в силу ряда объективных и субъективных причин, роль и значимость реального физического эксперимента постепенно снижается, а экспериментальная работа на уроке все чаще заменяется анализом виртуальных экспериментов. Учителя-предметники (физики, химики, биологи), если и пытаются организовать экспериментальную деятельность школьников по предмету, то отдают предпочтение демонстрационному эксперименту, зачастую переводя в такой эксперимент и часть программных лабораторных работ. Причины отказа от использования фронтального эксперимента вполне понятны: часто это отсутствие комплектов необходимого оборудования, а также дефицит времени для подготовки к уроку. Однако, необходимо учитывать тот факт, что организация проведения фронтальных опытов возможна и с использованием подручных средств и сконструированных самостоятельно простейших приборов. При этом лучше, когда в методическом арсенале учителя физики уже имеется тематический набор простейших приспособлений и материалов. Подобные комплекты могут быть собраны заранее, постоянно обновляться и пополняться.

Подобрать серию фронтально проводимых опытов и определить перечень необходимых материалов для них на самом деле не сложно, так как в информационном пространстве имеется уже достаточное количество видеороликов и видеофрагментов с полным описанием огромного количества экспериментов.

Так, процесс знакомства с физикой, как новым учебным предметом в 7 классе, можно организовать так, чтобы у школьников была возможность убедиться в том, что они самостоятельно способны открывать законы природы. Обыкновенная ручка с зажимом и ремень, например, позволяют создать проблемную ситуацию и продемонстрировать ее разрешение при изучении темы «Центр тяжести тел» - это фронтальный опыт под названием «Силовая ручка». Еще один опыт легко реализуется как фронтальный – «Воздушный кораблик». Его будет целесообразно предложить для выполнения семиклассникам при изучении темы «Состояния вещества». Для того, чтобы школьники имели возможность узнать свойства воздуха, им потребуется всего лишь: прозрачная ёмкость с широким горлышком, прозрачный стакан с узким горлышком, бумажный кораблик оригами и вода.

В 8 классе можно фронтально проделать опыт, который носит название «Золушка». Данный опыт прекрасно подходит для демонстрации взаимодействия зарядов, а для его подготовки необходимы простые материалы, которые легко собрать для каждого школьника: молотый перец (столовая ложка), соль (столовая ложка), воздушный шарик, шерстяная ткань и белый лист бумаги. Еще один фронтальный опыт – «Крепкий орешек», он идеально подойдет при изучении темы «Теплопроводность». В конце урока полезно создать проблемную ситуацию вопросом «всегда ли пламя свечи способно моментально расплавить резиновый шар?». Разрешение данной проблемы возможно после проделывания школьниками соответствующего эксперимента, для которого в качестве оборудования они будут использовать: два резиновых воздушных шара, зажигалку или спички, парафиновую свечу и воду.

Считаю, что такие комплекты простейших приспособлений и материалов для проведения фронтальных опытов должны стать непременной составляющей методического инструментария учителя физики на любой ступени ее изучения.

Все описанные фронтальные опыты могут быть проделаны и как домашний эксперимент. Но тогда школьники уже самостоятельно готовят необходимое оборудование. Например, при изучении электрических явлений в 8 классе учитель может предложить школьникам в домашних условиях построить собственный электроскоп и опытным путем понять принцип его работы. Для изготовления электроскопа потребуется: стеклянная банка с плотно закрывающей ее крышкой, гвоздь, железная проволока, жестяная фольга, стержень из органического стекла, лист бумаги. На следующий урок школьники приносят свои электроскопы, с помощью которых уже можно выполнять другие фронтальные опыты. Именно таким образом учитель может

пополнять свои экспериментальные комплекты работами учащихся. Таким образом, мы готовимся к уроку в процессе совместной работы.

Подводя итог, стоит ещё раз отметить, что необычность и оригинальность природных явлений, основные законы этих явлений школьники с успехом могут исследовать и открывать самостоятельно. Фронтальные эксперименты при этом, выступая как метод и средство обучения, стимулируют познавательный интерес, выявляют исследовательские и конструкторские способности школьника. Наличие заранее подобранных комплектов необходимых материалов для проведения таких экспериментов повышают эффективность работы учителя.

Список публикаций:

[1] Перишкин А. В., Гутник Е. М. // Школьный учебник по физике для 7 класса. 2013. С. 224.

[2] Перишкин А. В., Гутник Е. М. // Школьный учебник по физике для 8 класса. 2013. С. 240.

[3] Румбеишта Е.А., Ткачёв А.М. // Использование домашних опытов для развития мотивации учащихся основной школы к изучению физики. // Текст научной статьи по специальности «Научно-педагогическое образование». Томск: Томский государственный педагогический ун-т. 2020. С. 10.

Формирование инженерного мышления: методологические аспекты

Нерода Александр Андреевич

Томский политехнический университет

Ларионов Виталий Васильевич, д.п.н.

Neroda_94@mail.ru

Инженерное образование претерпевает изменения. За последние четыре года в стране увеличилось количество бюджетных мест в высших учебных заведениях с 518 тыс. человек в 2019 году до 590 тыс. человек в 2023 году. При этом, большинство вновь образованных мест были отданы на инженерные специальности. Заметная тенденция доказывает необходимость людей с инженерным образованием в целом для страны.

Для трансформации инженерного образования в высшей школе, а также формирования технологического суверенитета страны, возникает необходимость поиска баланса между соотношением в инженерной подготовке концепции прохождения стадий жизненного цикла и ответов на новые инженерные вызовы. Применение инженерного подхода к программированию образовательного пространства является логическим завершением трансформации, которую необходимо начинать с общеобразовательных организаций. Формирование инженерного мышления является одной из важнейших задач, стоящих перед современными общеобразовательными организациями.

Как отмечают Усольцев А.П. и Шамало Т.Н. [1] в подготовке современного поколения к инновационной деятельности в рамках процесса обучения акцент должен делаться на технологические, естественнонаучные и математические дисциплины. Существенный вклад в формирование инновационного инженерного мышления в общеобразовательной организации обеспечивает учебный предмет физика, позволяющий развивать конструкторские и изобретательские способности обучающихся. Ведущая роль рассматриваемого предмета в расширении у обучающихся общеобразовательных организаций практического опыта различных видов конструкторской и изобретательской деятельности, а также увеличении мотивации к изобретательской деятельности является неоспоримой. Наличие разнообразных педагогических методик и технологий, развивающих у обучающихся функциональную грамотность и инженерное мышление наводит на потребность детального рассмотрения наиболее благоприятных из них для внедрения в среднее общее образование.

Используемая в настоящее время модель обучения предметам естественно-научного направления имеет искусственный разрыв в изучении физики два года, зачастую порождающий утрату у многих обучающихся интереса к естественным наукам, а также забыванию тех первоначальных естественнонаучных знаний и умений, которые были получены ими в начальной школе в рамках предмета «Окружающий мир». Внедрение пропедевтического курса в 5-6 классах является одним из способов повышения интереса обучающихся к столь сложному предмету естественно-научного цикла с последующим увеличением количества обучающихся сдающих на ЕГЭ учебный предмет физика. Наличие мотивации к продолжению обучения в области инженерии является одним из решающих критериев диагностики готовности обучающихся к выбору инженерного уровня изучения физики в школе [2]. Основной акцент сделан на наблюдение и объяснение явлений, необходимый для решения обучающимися качественных задач. Необходимый уровень владения вычислительными навыками полностью соответствует программе по математике для 5-6 классов общеобразовательных организаций. Необходимо отметить, что рассматриваемый курс физики для 5-6 классов не заменяет изучение физики в последующих классах, а служит пропедевтическим курсом для последующего систематического изучения предмета.

Представленная инженерно-ориентированная модель обучения физике подразумевает владение педагогом современными подходами и методиками для достижения целей и задач образовательного процесса, прописанных в ФГОС ООО нового поколения, а также для наращивания межпредметных связей на отдельно взятом уроке и становления функциональной грамотности у обучающихся. Одной из технологий, вызывающих особую потребность педагога в связи с выше сказанным, является технология «Перевернутый класс». Основным принципом работы по данной модели обучения является некая смена ролей обучающегося и педагога – предполагается первоначальное самостоятельное внеаудиторное изучение обучающимися нового материала. Освободившаяся часть аудиторного времени используется для частичного рассмотрения некоторых теоретических аспектов, больше направлена на практическое закрепление полученных знаний с помощью более сложных видов познавательной деятельности.

Педагогическая технология смешанного обучения «перевернутый класс» помогает использовать активные формы деятельности, для участия в которой требуется предварительная самостоятельная подготовка. Такой способ ведения учебных занятий напрямую позволяет развивать все компоненты функциональной грамотности на каждом уроке. При традиционной форме развивается чаще лишь часть компонентов в зависимости от предметности и вида занятия, критическое мышление остается за пределами такого вида обучения. При использовании перевернутого обучения обучающийся на многое должен ответить самостоятельно или в мини-группах, выдвигать гипотезы, проводить эксперименты и анализировать полученные данные.

Предложенная модель обучения необходима, чтобы учитывать ключевую проблему физики как предмета, а именно - сложность и междисциплинарность законов и явлений, рассматриваемых на занятиях. С качественными и количественными задачами многие обучающихся общеобразовательных школ не справляются. Метод исследования ключевых ситуаций позволяет выйти из затруднительного положения и обращает внимание учителя и обучающегося на исследовательском подходе при изучении физики и обучении решению задач. При использовании вышеозначенного метода множество расчетных задач формируются в несколько ситуаций, которые можно назвать ключевыми. При рассмотрении ситуаций, повторяющихся в большом количестве существующих задач, происходит диалог между учителем и обучающимся для более глубокого рассмотрения с различных сторон. Рассматриваемый метод способствует развитию функциональной грамотности обучающихся. Актуальность полемики о функциональной грамотности обучающихся подтверждается различными мероприятиями, проводимыми для учителей: педагогических семинаров, конференций, вебинаров, круглых столов. В основе организации функционального обучения лежит принцип поисковой, учебно-познавательной деятельности ученика, т. е. принцип «открытия» им научных фактов, явлений, законов, методов исследования и способов приложения знаний на практике [3].

Таким образом, при рассмотрении вышеупомянутой инженерно-ориентированной модели обучения физике есть возможность наблюдения некоторых особенностей. Рассматриваемые методы и технологии устраняют грань между теоретическими знаниями обучающегося и решением качественных и количественных задач. Это позволяет привить обучающемуся стремление к пониманию физического смысла формулировок определений и формул, исключая простое заучивание. С помощью процесса применения знаний обучающимся возникает понимание, что является основной целью деятельностного подхода, являющегося основой развития функциональной грамотности обучающихся.

Список публикаций:

- [1] Усольцев А. П., Шамало Т. Н. Понятие инновационного мышления //Педагогическое образование в России. – 2014. – №. 1. – С. 94-98.
- [2] Ларионов В. В., Нерода А. А. Готовность педагога обеспечить инженерный подход при обучении физике: технологические аспекты //Педагогическое образование в России. – 2022. – №. 4. – С. 154-163.
- [3] Нерода А. А. Формирование функциональной грамотности на базе педагогической технологии «перевернутый класс» //преподаватель года 2022. – 2022. – С. 82-89.

Алфавитный указатель

Абдрахимов С. А.	165	Жидель К. М.	39	Павленко М. А.	261
Абдурахимов М. А.	271	Жуйков Д. А.	151	Панова А. В.	262
Аверкиев И. К.	125	Журин Т. А.	136	Папазян Д. А.	79
Андронов А. А.	83	Закирьянов Ф. К.	167	Параскун А. Г.	89
Андронов А. А.	82	Зиннатуллин Р. Р.	26	Перевалова А. Н.	51
Антохина К. В.	76	Зуева Е. А.	105	Петрова О. В.	140
Арсланов К. П.	125	Иванов С. В.	106	Пикуль А. Д.	242
Астафьев П. А.	34	Ивашева Е. Е.	108	Плахотняя Д. П.	304
Асылкаев А. М.	204	Ильсова Г. Ф.	109	Плюхина А. А.	148
Афанасьев М. О.	205	Исламов Д. Р.	67	Подкин Е. С.	243
Ахняпов Э. Ш.	272	Калашникова К. А.	300	Полякова П. В.	244
Аюпов А. Р.	206	Карачурин А. И.	212	Полянский Д. А.	281
Бакина К. А.	126	Каримова Г. Р.	213	Полянский Д. А.	280
Баранов Д. К.	35	Кафиров Р. Г.	111	Полянский Д. А.	305
Бармин Н. М.	253	Кислякова Д. П.	27	Пронина Е. В.	174
Бережной Д. А.	274	Классман Е. Ю.	236	Рогозникова Н. С.	116
Билюкова М. Р.	150	Ковалёва А. Р.	322	Ромашко П. Е.	117
Бобылев В. А.	295	Ковальчук Т. Н.	289	Рудников Н. А.	306
Богуславский Л. Г.	98	Кондратьева Э. Р.	184	Сабилова А. Р.	192
Бронникова Ю. И.	231	Коноплев А. А.	256	Сайфулинов Т. К.	307
Буглова Я. О.	64	Константинов А. С.	238	Самигуллина А. И.	27
Булатова А. З.	207	Константинова Е. И.	40	Самойлова М. А.	153
Бураева Е. А.	296	Коренистов П. С.	42	Сафиуллин А. Р.	217
Валитов Д. Р.	275	Коренистов П. С.	41	Свинцицкий М. Ю.	283
Валиуллина В. И.	208	Корытников А. А.	185	Сдобнова В. П.	263
Ван Ш. -	127	Кочкин А. С.	42	Северова С. В.	118
Вахрушева Е. П.	166	Краснова И. А.	68	Семенова А. А.	175
Веретенников Д. Г.	77	Кудояров Д. Ш.	168	Сидько С. С.	141
Верясова А. А.	99	Кудряшкин Н. А.	258	Скандаков Р. Н.	142
Веселова Е. Ю.	182	Кузнецова А. Ю.	43	Смыгалина П. П.	176
Воробьев М. О.	320	Кузнецова А. А.	87	Спечев Ю. В.	245
Вэн Л. -	128	Кузьминов Д. А.	138	Степухов Е. М.	246
Габбасов Р. Р.	232	Курасова А. С.	69	Суюндукова А. Т.	177
Габдрахманова Л. А.	233	Курпитко Е. Е.	187	Тайлашева К. А.	308
Габдыев Д. Н.	198	Лебедев М. С.	152	Татаринцева М. А.	310
Галеев Р. Р.	210	Лисовицкий А. С.	188	Теплинская А. С.	247
Гаппель Е. В.	130	Лопатюк А. В.	278	Герентьева Д. В.	52
Гарифуллин И. Ш.	211	Лысенко В. Ю.	170	Тимофеев В. С.	54
Герасимов Р. Г.	65	Макаров П. А.	140	Тимофеева А. В.	120
Гладких М. В.	78	Маломыжева Н. В.	301	Тинюкова Т. С.	28
Глухов К. И.	36	Мамаева З. З.	214	Трифонов И. О.	55
Говорина В. В.	100	Марков И. Ю.	112	Трофимов М. С.	70
Голубятникова А. А.	101	Медведев В. В.	303	Уткин М. А.	57
Горьковская Д. А.	85	Меренцов А. И.	46	Фазлетдинов С. У.	219
Гриднева Г. Т.	102	Меренцова К. А.	46	Фарвазов Л. Э.	220
Гризодуб А. Н.	255	Милованова А. А.	191	Фаткуллина Н. Б.	222
Гуляев К. Е.	104	Митюшкин Е. О.	239	Фатталова Д. Р.	195
Гун Ц. -	132	Михайлов М. А.	259	Фаттахов С. Р.	223
Гусейнов Т. З.	37	Мухарямова Г. И.	215	Фатхуллин А. И.	224
Деринг Е. Д.	288	Мухутдинова А. А.	216	Фахретдинова А. Л.	226
Дмитриев В. О.	234	Недоедкова О. В.	47	Филинкова М. С.	311
Дмитриева Л. Р.	133	Нерода А. А.	323	Филиппова В. В.	121
Долгова А. В.	86	Нечаев А. Н.	171	Фитагдинов Р. Р.	161
Дорофеева В. В.	38	Нечитайлова И. О.	48	Фоминых Б. М.	58
Дубров Н. И.	298	Низамиева А. Ф.	172	Фролова В. П.	90
Евграфов А. М.	235	Низямова А. Р.	114	Хаметова Э. Ф.	143
Евтихов В. В.	275	Огнев С. О.	49	Хань Т. -	145
Еремкин Е. В.	135	Орехова С. М.	115	Харченко Д. Г.	264
Ефимова М. В.	276	Павленко А. С.	240	Чепа А. Р.	312

Чернов Е. Д.....	59	Шауро В. П.....	283	Шишкин М. А.	74
Чехова А. С.....	72	Шашков Д. И.....	60	Шкварин А. С.....	61
Чечина М. С.....	155	Шаяхметова Ф. Ф.....	193	Штыфлюк М. Е.	316
Чечина М. С.....	154	Швец А. С.....	157	Шульга В. В.	317
Чуприков А. И.....	291	Швецова Д. А.	314	Щербина Д. С.....	92
Чучук Т. А.	265	Шевченко А. К.....	266	Юлдашева А. Р.....	62
Шалагинов А. Н.	122	Широбокова А. С.....	248	Юрченко Е. А.....	178
Шаповалов Е. С.....	313	Ширяева А. А.....	159	Юсупова Р. У.	227

МАТЕРИАЛЫ КОНФЕРЕНЦИИ ВНКСФ-27 И ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

Ответственный за выпуск: Арапов А.Г.

Отпечатано в соответствии с качеством предоставленных диапозитивов.

Подписано в печать 11 апреля 2023 г.

Формат 60x84 1/8 Офсетная печать

Ую-изд.л. Тираж 300 экз.