

ISSN 1563-034X  
Индекс 75877; 25877

ӘЛ-ФАРАБИ атындағы ҚАЗАҚ ҰЛТТЫҚ УНИВЕРСИТЕТІ

# ҚазҰУ ХАБАРШЫСЫ

Физика сериясы

---

КАЗАХСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ имени АЛЬ-ФАРАБИ

# ВЕСТНИК КазНУ

Серия физическая

---

AL-FARABI KAZAKH NATIONAL UNIVERSITY

# JOURNAL

Physics series

---

№1 (60)

Алматы  
«Қазақ университеті»  
2017



# ХАБАРШЫ

ФИЗИКА СЕРИЯСЫ №1 (60)



25.11.1999 ж. Қазақстан Республикасының Мәдениет, ақпарат және қоғамдық келісім министрлігінде тіркелген

Куәлік №956-Ж.

Журнал жылына 4 рет жарыққа шығады

## ЖАУАПТЫ ХАТШЫ

**Иманбаева А.К.** (Қазақстан)

Телефон: +7(727) 377-33-46

E-mail: akmaral@physics.kz

## РЕДАКЦИЯ АЛҚАСЫ:

**Рамазанов Т.С.**, әл-Фараби атындағы ҚазҰУ – ғылыми редактор (Қазақстан)

**Лаврищев О.А.**, ЭТФҒЗИ – ғылыми редактордың орынбасары (Қазақстан)

**Әбишев М.Е.**, әл-Фараби ат. ҚазҰУ, ЭТФҒЗИ (Қазақстан)

**Архипов Ю.В.**, әл-Фараби ат. ҚазҰУ, ЭТФҒЗИ (Қазақстан)

**Асқарова Ә.С.**, әл-Фараби ат. ҚазҰУ, ЭТФҒЗИ (Қазақстан)

**Буркова Н.А.**, әл-Фараби ат. ҚазҰУ, ЭТФҒЗИ (Қазақстан)

**Boufendi L.**, Орлеан қ. университеті (Франция)

**Ғабдуллин М.Т.**, Ашық түрдегі ұлттық нанотехнологиялық зертхана, әл-Фараби ат. ҚазҰУ (Қазақстан)

**Давлетов А.Е.**, әл-Фараби ат. ҚазҰУ, ЭТФҒЗИ (Қазақстан)

**Жұмағұлова Қ.Н.**, әл-Фараби ат. ҚазҰУ, ЭТФҒЗИ (Қазақстан)

**Дробышев А.С.**, әл-Фараби ат. ҚазҰУ, ЭТФҒЗИ (Қазақстан)

**Жаңабаев З.Ж.**, әл-Фараби ат. ҚазҰУ, ЭТФҒЗИ (Қазақстан)

**Кукулин В.Л.**, М.В. Ломоносов ат. ММУ (Ресей)

**Оскомов В.В.**, әл-Фараби ат. ҚазҰУ, ЭТФҒЗИ (Қазақстан)

**Приходько О.Ю.**, әл-Фараби ат. ҚазҰУ, ЭТФҒЗИ (Қазақстан)

**Rosenblum M.**, Потсдам университетінің Физика және астрофизика институты (Германия)



## Ғылыми басылымдар бөлімінің басшысы

*Гүлмира Шаккозова*

Телефон: +77017242911

E-mail: Gulmira.Shakkozova@kaznu.kz

## Компьютерде беттеген

*Айгүл Алдашева*

## Жазылу мен таратуды үйлестіруші

*Мөлдір Омиртайқызы*

Телефон: +7(727)377-34-11

E-mail: Moldir.Omirtaikyzy@kaznu.kz

## ИБ №1

Басуға 05.05.2017 жылы қол қойылды.

Пішімі 60x84 <sup>1</sup>/<sub>8</sub>. Көлемі 0 б.т. Офсетті қағаз.

Сандық басылыс. Тапсырыс № . Таралымы 500 дана.

Бағасы келісімді.

Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университетінің

«Қазақ университеті» баспа үйі.

050040, Алматы қаласы, әл-Фараби даңғылы, 71.

«Қазақ университеті» баспа үйінің баспаханасында басылды.

1-бөлім  
**ЖЫЛУ ФИЗИКАСЫ ЖӘНЕ  
ТЕОРИЯЛЫҚ ЖЫЛУ ТЕХНИКАСЫ**

---

Раздел 1  
**ТЕПЛОФИЗИКА И  
ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ТЕПЛОТЕХНИКА**

---

Section 1  
**THERMAL PHYSICS AND  
THEORETICAL THERMAL ENGINEERING**

Жаврин Ю.И.,  
Молдабекова М.С.,  
Асембаева М.К.,  
Федоренко О.В.,  
Мукамеденкызы В.

**Температурные зависимости  
эффективных коэффициентов  
диффузии для двух  
многокомпонентных газовых  
систем, содержащих воздух,  
водород и некоторые  
углеводороды**

Zhavrin Yu.I.,  
Moldabekova M.S.,  
Asembaeva M.K.,  
Fedorenko O.V.,  
Mukamedenkzy V.

**Temperature dependences of the  
effective diffusion coefficients  
for two multicomponent gaseous  
systems containing air, hydrogen  
and some hydrocarbons**

Жаврин Ю.И.,  
Молдабекова М.С.,  
Асембаева М.К.,  
Федоренко О.В.,  
Мукамеденкызы В.

**Құрамында ауа, сутегі және  
кейбір көмірсутектері бар екі  
көпкомпонентті газ қоспалары  
үшін эффективті диффузия  
коэффициенттерінің  
температуралық тәуелділігі**

В данной статье представлены расчеты показателей степеней температурных зависимостей эффективных коэффициентов диффузии (ЭКД) газов в двух многокомпонентных смесях, которые в той или иной мере могут использоваться при горении газообразного топлива.

Приведенные схемы расчетов температурных зависимостей ЭКД проведены для интервала температур 298 – 900 К и атмосферного давления. Основными источниками информации по данной работе являлись публикации ряда ученых, а также исследования авторов данной статьи, которые, в свое время, разработали и аттестовали во ВНИЦ МВ Госстандарта СССР таблицы рекомендуемых справочных данных по ЭКД для технически важных диффундирующих многокомпонентных смесей.

Полученные результаты позволяют полнее раскрыть механизм диффузионного процесса в сложных газовых смесях с изменением температуры, дать оценку переносу каждого компонента и суммарного массопереноса в целом. Можно надеяться, что представленные результаты послужат в качестве нового справочного материала.

**Ключевые слова:** диффузия, ЭКД, бинарная диффузия, бароэффект, массоперенос.

Calculations of the exponents of temperature dependences of the effective diffusion coefficients (EDC) of gases for two multicomponent mixtures, which can be used for the combustion of gaseous fuels, are presented in the article.

Transport properties of gases and its mixtures subject to the temperature effect are determined as the functional dependence. Temperature dependence of the EDC of components is presented in the semiempirical formula, which is similar to the power dependence of interdiffusion coefficients (IDC) on temperature. Given calculation schemes of the temperature dependences of EDC are carried out for the temperature range of 298 – 900 K and the atmospheric pressure. The main sources of information for this work are the publication of a number of scientists, as well as the researches made by the authors of this article who developed tables of the recommended reference data of EDC for technically important diffusing multicomponent mixtures and certified them in the NRC MS of the State standard specification of USSR

The results allow revealing the mechanism of diffusion process in the complex gas mixtures under the temperature change and evaluating the transfer of each component and the total mass transport. The presented results can be used for the new reference data.

**Key words:** diffusion, EDC, binary diffusion, baroeffect, mass transfer.

Аталған мақалада газ тәрізді отынның жануында қолдануға болатын екі көпкомпонентті газ қоспасының эффективтік диффузия коэффициенттерінің температуралық тәуелділіктерінің көрсеткіш дәрежелерін есептеу көрсетілген.

Атмосфералық қысым мен температура интервалы 298-900 К аралығында болатын газ жүйелері үшін эффективтік диффузия коэффициенттерінің температуралық тәуелділігін есептеу кестелері келтірілген. Жұмыстағы негізгі мәліметтер ғалымдардың жариялымдары мен мақала авторларының КСРО Госстандартында дайындалып аттестацияланған техникалық маңызды көпкомпонентті газ қоспаларының ЭДК-і үшін жасалған анықтамалық зерттеу нәтижелері.

Алынған нәтижелер температура өзгерісі бойынша диффузиялық процестің толық механизмін ашуға мүмкіндік береді. Сонымен қатар, нәтижелер жаңа анықтамалық материал ретінде қолданылуы мүмкін.

**Түйін сөздер:** диффузия, ЭДК, бинарлық диффузия, бароэффект, массатасымалдау.

**ТЕМПЕРАТУРНЫЕ  
ЗАВИСИМОСТИ  
ЭФФЕКТИВНЫХ  
КОЭФИЦИЕНТОВ  
ДИФФУЗИИ ДЛЯ ДВУХ  
МНОГОКОМПОНЕНТ-  
НЫХ ГАЗОВЫХ СИСТЕМ,  
СОДЕРЖАЩИХ  
ВОЗДУХ, ВОДОРОД И  
НЕКОТОРЫЕ  
УГЛЕВОДОРОДЫ**

**Введение**

Температурные зависимости эффективных коэффициентов диффузии (ЭКД) газов в многокомпонентных системах на сегодняшний день вообще не представлены в справочной литературе, а число публикаций по данной тематике весьма ограничено. Однако для многих процессов, например, горение газообразного топлива, такая информация необходима и важна, так как позволяет более реально описать практическую часть процесса.

В данной статье представлены расчеты показателей степеней температурных зависимостей ЭКД газов для двух многокомпонентных газовых систем, компоненты которых в той или иной мере используются при горении газообразного топлива.

Авторы публикации сочли возможным на основании, имеющихся в литературных источниках сведений по температурным зависимостям коэффициентов взаимной диффузии (КВД) водорода и ряда углеводородных газов, расширить границы сведений о температурных зависимостях ЭКД компонентов в двух диффундирующих смесях: воздуха, водорода, метана, этана, пропана и *n*-бутана. Полученные результаты позволят полнее раскрыть механизм диффузионного процесса в сложных газовых смесях с изменением температуры, дать оценку переносу каждого компонента и суммарного массопереносу в целом.

Поставленную задачу о расчете переносных и других свойств газов и их смесей с учетом влияния термодинамических параметров (в данном случае температуры) можно решить, не прибегая к дорогостоящим экспериментам и представить конечный результат в компактной форме, например, в виде функциональных зависимостей.

В данной работе температурная зависимость ЭКД компонентов представлена в виде полуэмпирической формулы аналогичной формуле степенной зависимости КВД от температуры

$$D_{Ti}^{эф} = D_{0i}^{эф} \left( \frac{T}{T_0} \right)^{n_i}, \quad (1)$$

где  $n_i$  – показатель степени, а  $D_{0i}^{эф}$  – ЭКД  $i$  – го компонента для начальной температуры  $T_0$  (в наших расчетах  $T_0 = 298$  К).

Такое представление вполне оправдано, так как метод эффективного коэффициента диффузии основан на том предположении, что процесс многокомпонентного массопереноса можно описать ЭКД [1], который в случае бинарной системы будет тождественно равен КВД. Формально это утверждение для одномерного случая записывается в виде первого закона Фика

$$j_i = -D_i^{\text{эф}} \frac{dc_i}{dx}, \quad (2)$$

где  $j_i$ ,  $c_i$  – плотность диффузионного потока и концентрация  $i$ -го компонента, соответственно.

Таким образом, поток  $i$ -го компонента в  $k$ -компонентной газовой смеси определяется только градиентом данного компонента и его ЭКД.

Апробация этого метода на многочисленных экспериментах, в том числе и по определению температурных зависимостей ЭКД (см., например, [2-6]) показала, что он физически правильно описывает диффузионный процесс с достаточной для практики точностью и, кроме того, прост в использовании [7-9].

В литературе приводится ряд записей выражений для ЭКД. Мы будем использовать выражение из работ (см., например, [10]), которое легко проверяется в диффузионных экспериментах.

$$D_i^{\text{эф}} = D_{ii}^* + \sum_{j=1}^{k-1} D_{ij}^* \frac{dc_j}{dc_i}, \quad (3)$$

где  $D_{ii}^*$ ,  $D_{ij}^* = f(D_{ij}, y_i, y_j)$  – главные и перекрестные «практические» коэффициенты диффузии (ПКД) или матричные коэффициенты многокомпонентной диффузии (МКМД);  $dc_j/dc_i$  – отношение, связывающее изменение концентрации  $j$ -го компонента с изменением концентрации  $i$ -го компонента;  $D_{ij}$  – КВД пары газов  $i$  и  $j$ ;  $y_i, y_j$  – мольные доли компонентов  $i$  и  $j$ .

Выражение (3) в локальных величинах сложно для применения, поэтому его упрощают, заменяя его интегральным (усредненным по всему диффузионному слою) ЭКД  $i$ -го компонента в  $k$ -компонентной смеси. Величины  $D_{ii}^*$ ,  $D_{ij}^*$  рассчитываются для усредненных (среднее арифметическое) мольных долей, а отношение градиентов заменяют отношением разностей концентраций компонентов между точками  $\theta$  и  $L$  на границах диффузионного слоя

$$\bar{D}_i^{\text{эф}} = \bar{D}_{ii}^* + \sum_{j=1}^{k-1} \bar{D}_{ij}^* \left( \frac{c_j^L - c_j^0}{c_i^L - c_i^0} \right), \quad (4)$$

Из (4) следует, что в зависимости от распределения компонентов внутри системы зависит знак ЭКД, который может быть как положительный, так и отрицательный.

### Методика исследования

Для проведения экспериментальных исследований по измерению ЭКД авторы, в большинстве случаев, использовали двухколбовые диффузионные аппараты [11]. Конструкция аппарата, приборов и узлов, входящих в экспериментальную установку, а также методика работы детально описаны в [12]. Первый аппарат имел следующие параметры: объемы верхней и нижней колб –  $V_e = V_n = 76,9 \text{ см}^3$ ; длина и диаметр диффузионного канала  $L = 7,055 \text{ см}$  и  $d = 0,4 \text{ см}$ , а второй –  $V_e = V_n = 62,0 \text{ см}^3$ ; длину и диаметр канала  $L = 7,055 \text{ см}$  и  $d = 0,330 \text{ см}$  соответственно. Комплекс геометрических размеров, так называемая постоянная прибора  $B = L_{\text{эф}} \cdot V_e \cdot V_n / S \cdot (V_e + V_n)$ , (здесь  $S$  – площадь поперечного сечения канала, а  $L_{\text{эф}}$  – эффективная длина диффузионного канала [13]) для первого аппарата была равна –  $2215 \text{ см}^2$ , а для второго –  $2653 \text{ см}^2$ . В представленных ниже расчетах использовался аппарат, постоянная которого была равна  $2500 \text{ см}^2$ .

В данной работе через численный эксперимент были определены показатели степеней температурных зависимостей ЭКД компонентов для систем: 1.  $\text{H}_2(1) - 0,25\text{CH}_4(2) + 0,25\text{C}_2\text{H}_6(3) + 0,25\text{C}_3\text{H}_8(4) + 0,25\text{n-C}_4\text{H}_{10}(5)$  и 2.  $\text{Air}(1) - 0,2\text{H}_2(2) + 0,2\text{CH}_4(3) + 0,2\text{C}_2\text{H}_6(4) + 0,2\text{C}_3\text{H}_8(5) + 0,2\text{n-C}_4\text{H}_{10}(6)$  (здесь концентрации газов приведены в мольных долях, а после химического символа указана нумерация газов, которую для удобства будем использовать в дальнейшем) в интервале температур  $298 - 900 \text{ К}$  и давлении равном  $0,101 \text{ МПа}$ .

Ограничения, которые при работе с этими системами необходимо было соблюдать, приняты во внимание. Они сводились к следующему: во-первых, газы и их смеси идеальные, во-вторых, температуры не нарушали структуру диффундирующих компонентов.

Для проведения расчетов температурных зависимостей ЭКД компонентов согласно (1) необходимо знать значения  $D_{0i}^{\text{эф}}$  для каждого компонента смеси при  $T_0 = 298 \text{ К}$  и показатель степени температурной зависимости  $n_i$ . Однако, для ряда пар газов  $n_i$  не были измерены экспериментально, поэтому их находить приходилось расчетом, используя предложенные методики.

Во-первых, используя справочные данные о температурных зависимостях КВД пар газов, входящих в системы, рассчитывались КВД при соответствующих температурах от 298 до 900 К с интервалом в 100 К. Особо отметим, что в литературе нам не удалось найти показатели степеней температурных зависимостей для пар газов: Air-H<sub>2</sub>, Air-CH<sub>4</sub>, Air-C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>, Air-C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>, Air-n-C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>-C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>-n-C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>, C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>-n-C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>. Поэтому пришлось обратиться к рекомендации [14] «Однако  $D_{T_i} = D_{T_1} \left(\frac{T_2}{T_1}\right)^{3/2}$  приближенно отображает зависимость  $D$  от  $T$ . Эта формула дает лучшие ре-

зультаты, если показатель 3/2 заменить в ней на ~ 1,80 (стр. 465)», что нами и было сделано.

Тогда КВД пар газов в системе в зависимости от температуры  $T = 298, 400, 500, 600, 700, 800, 900$  К и  $P = 0,101$  МПа имели значения [15,16] (таблица 1).

В дальнейшем КВД из таблицы 1 использовались для определения  $D_i^{эф}$  каждого газа для начального распределения концентраций по методике, предложенной в работах [3, 4]. Из полученных данных согласно (1) определялись  $n_i$  – показатели степеней температурных зависимостей компонентов. Результаты вычислений представлены в таблице 2.

**Таблица 1** – Коэффициенты взаимной диффузии некоторых пар газов в зависимости от температуры

Пара газов (степень температурной зависимости, ссылка)	Температура, К						
	298	400	500	600	700	800	900
	Коэффициенты взаимной диффузии, см <sup>2</sup> /с						
CH <sub>4</sub> – H <sub>2</sub> (1,81,[15])	0,705	1,201	1,799	2,503	3,308	4,213	5,214
CH <sub>4</sub> – C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> (1,70,[15])	0,154	0,253	0,370	0,505	0,656	0,823	1,005
CH <sub>4</sub> – C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> (1,89,[15])	0,125	0,218	0,332	0,469	0,627	0,807	1,008
CH <sub>4</sub> – n-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> (1,57,[15])	0,106	0,168	0,239	0,317	0,404	0,499	0,600
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> – H <sub>2</sub> (1,71,[15])	0,577	0,954	1,397	1,908	2,483	3,121	3,818
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> – H <sub>2</sub> (1,71,[15])	0,448	0,741	1,084	1,481	1,928	2,423	2,964
n-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> – H <sub>2</sub> (1,64,[15])	0,378	0,613	0,884	1,192	1,535	1,910	2,317
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> – C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> (1,80,[14,16])	0,078	0,131	0,196	0,271	0,358	0,456	0,563
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> – n-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> (1,80,[14,16])	0,067	0,112	0,168	0,233	0,307	0,390	0,483
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> – n-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> (1,81,[14,16])	0,051	0,085	0,127	0,176	0,233	0,296	0,366
Air-H <sub>2</sub> (1,81,[14,16])	0,773	1,317	1,972	2,744	3,626	4,618	5,715
Air-CH <sub>4</sub> (1,75,[14,16])	0,217	0,363	0,537	0,739	0,967	1,222	1,501
Air-C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> (1,80,[14,16])	0,144	0,245	0,366	0,508	0,670	0,852	1,053
Air-C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> (1,80,[14,16])	0,111	0,189	0,282	0,391	0,516	0,657	0,812
Air-n-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> (1,80,[14,16])	0,079	0,134	0,201	0,278	0,368	0,467	0,578

**Таблица 2** – ЭКД и показатели степеней температурных зависимостей компонентов системы H<sub>2</sub>(1) – 0,25CH<sub>4</sub>(2) + 0,25C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>(3) + 0,25C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>(4) + 0,25n-C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>(5) для начального распределения концентраций в интервале температур 298-900 К

Газы	ЭКД компонентов, см <sup>2</sup> /с							
	Показатели степеней температурных зависимостей							
	Температура, К							
	298	400	500	600	700	800	900	<n>
H <sub>2</sub>	0,503	0,831	1,216	1,661	1,661	2,713	3,317	
		1,706	1,706	1,707	1,707	1,707	1,707	1,707
CH <sub>4</sub>	0,562	0,936	0,773	1,889	1,889	3,108	3,809	
		1,733	1,733	1,732	1,732	1,732	1,731	1,732

Газы	ЭКД компонентов, см <sup>2</sup> /с							
	<i>Показатели степеней температурных зависимостей</i>							
	Температура, К							
	298	400	500	600	700	800	900	<n>
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	0,511	0,848	0,482	1,695	1,695	2,771	3,390	
		<i>1,719</i>	<i>1,714</i>	<i>1,713</i>	<i>1,712</i>	<i>1,712</i>	<i>1,712</i>	<i>1,714</i>
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	0,478	0,788	1,935	1,568	1,568	2,555	3,121	
		<i>1,696</i>	<i>1,696</i>	<i>1,698</i>	<i>1,70</i>	<i>1,699</i>	<i>1,698</i>	<i>1,70</i>
n-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	0,460	0,753	0,992	1,491	1,491	2,419	2,949	
		<i>1,674</i>	<i>1,678</i>	<i>1,680</i>	<i>1,681</i>	<i>1,681</i>	<i>1,681</i>	<i>1,68</i>

Здесь необходимо дать пояснения. Так как рассматриваемый процесс является нестационарным, то вычисленные значения ЭКД в таблице 2 соответствуют начальному распределению концентраций всех компонентов, т.е. равновесной смеси  $0,5\text{H}_2 + 0,125\text{CH}_4 + 0,125\text{C}_2\text{H}_6 + 0,125\text{C}_3\text{H}_8 + 0,125\text{n-C}_4\text{H}_{10}$ .

Выделенные *курсивом* показатели степеней температурных зависимостей ЭКД компонентов определялись для каждой температуры, начиная, с 400 К, а в дальнейшем для

практического использования приведены усредненные показатели температурных зависимостей всех пяти компонентов данной газовой системы.

В наших публикациях, связанных с определением температурных зависимостей газов в многокомпонентных смесях, неоднократно отмечалось, что влияние концентрации компонента весьма слабо отражается на показателе степени температурной зависимости компонента (см., например, [6]).

**Таблица 3** – ЭКД и показатели степеней температурных зависимостей компонентов системы Air(1) – 0,20H<sub>2</sub>(2) + 0,20CH<sub>4</sub>(3) + 0,2C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>(4) + 0,2C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>(5) + 0,20n-C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>(6) для начального распределения концентраций в интервале температур 298-900 К

Газы	Температура, К							
	ЭКД компонентов, см <sup>2</sup> /с							
	<i>Показатели степеней температурной зависимости</i>							
	298	400	500	600	700	800	900	<n>
Air	0,198	0,334	0,498	0,688	0,905	1,147	1,415	
		<i>1,781</i>	<i>1,782</i>	<i>1,765</i>	<i>1,768</i>	<i>1,769</i>	<i>1,770</i>	<i>1,773</i>
H <sub>2</sub>	0,643	1,081	1,601	2,206	2,894	3,660	4,502	
		<i>1,763</i>	<i>1,760</i>	<i>1,761</i>	<i>1,761</i>	<i>1,760</i>	<i>1,761</i>	<i>1,761</i>
CH <sub>4</sub>	0,160	0,270	0,393	0,539	0,704	0,888	1,089	
		<i>1,765</i>	<i>1,736</i>	<i>1,736</i>	<i>1,735</i>	<i>1,736</i>	<i>1,735</i>	<i>1,741</i>
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	0,093	0,160	0,241	0,337	0,447	0,572	0,710	
		<i>1,837</i>	<i>1,848</i>	<i>1,846</i>	<i>1,843</i>	<i>1,840</i>	<i>1,839</i>	<i>1,842</i>
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	0,064	0,108	0,166	0,232	0,309	0,396	0,493	
		<i>1,805</i>	<i>1,854</i>	<i>1,850</i>	<i>1,851</i>	<i>1,852</i>	<i>1,853</i>	<i>1,844</i>
n-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	0,030	0,055	0,087	0,124	0,170	0,220	0,279	
		<i>2,034</i>	<i>2,053</i>	<i>2,028</i>	<i>2,031</i>	<i>2,018</i>	<i>2,018</i>	<i>2,030</i>



Пояснения результатов этой таблицы аналогичны пояснениям к таблице 2.

Аналогичные исследования были проведены для второй системы. Полученные результаты отображены в таблице 3.

Пояснения результатов этой таблицы аналогичны пояснениям к таблице 2.

Особо подчеркнем. При использовании ЭКД для вычислений диффузионных потоков в многокомпонентных газовых смесях необходимо помнить, для каких случаев диффузии получены выражения ЭКД (они, кстати, четко сформулированы в монографии [16]). Иначе можно сделать грубые ошибки.

## Заключение

Таким образом, вычисленные ЭКД и показатели степеней температурных зависимостей газов в пятикомпонентной и шестикомпонентной системах, содержащих воздух, водород и некоторые углеводородные газы, могут служить в качестве справочной информации в практических приложениях. Из проведенных исследований следует, что в сложных газовых смесях необходимо иметь сведения о поведении всех газов во время диффузии для корректной оценки их диффузионных способностей.

## Литература

- 1 Косов Н.Д., Жаврин Ю.И., Новосад З.И. Диффузия в многокомпонентных газовых смесях // Теплофизические свойства веществ и материалов. – М.: Изд-во стандартов. – 1982, вып. 17. – С. 86-112.
- 2 Бычков А.Г., Жаврин Ю.И. Температурная зависимость эффективных коэффициентов диффузии некоторых смесей в изотермических и неизотермических условиях // НИИ ЭТФ Каз.ун-т. – Алма-Ата, 1993. – 10 с. Деп. В КазНИИКИ. 15.01.93. № 3985. Ка-93.
- 3 Жаврин Ю.И., Косов Н.Д., Новосад З.И. Расчет эквимолярной диффузии в многокомпонентных газовых смесях методом эффективных коэффициентов // Диффузия в газах и жидкостях. – Алма-Ата: МВ и ССО КазССР, 1974. – С. 12-19.
- 4 Жаврин Ю.И., Жаврин В.Ю., Косов В.Н., Поярков И.В. Расчет многокомпонентного массопереноса в двухколбовом аппарате с применением языка программирования DELPHI // Вестник КазНУ, сер. физическая. – Алматы. – 2006, № 2 (22). – С. 73-79.
- 5 Жаврин Ю.И., Косов В.Н., Поярков И.В., Федоренко О.В., Асембаева М.К. Температурная зависимость эффективных коэффициентов диффузии продуктов сгорания метана, пропана и бутана в воздухе // Вестник КазНУ, серия физическая. – 2011. – № 1 (36). – С. 71-75.
- 6 Жаврин Ю.И., Косов В.Н., Асембаева М.К., Поярков И.В., Федоренко О.В. Влияние концентрации на температурные зависимости эффективных коэффициентов диффузии // Известия НАН РК, серия физ.-мат. – 2011. – № 3 (277). – С. 41-47.
- 7 Тирский Г.А. Вычисление эффективных коэффициентов диффузии в ламинарном диссоциированном многокомпонентном пограничном слое // ПММ. – 1969, Вып. 1. – С. 180-182.
- 8 Жаврин Ю.И., Косов Н.Д., Новосад З.И. Описание нестационарной диффузии в многокомпонентных газовых смесях методом эффективных коэффициентов // ЖФХ. – 1975. – Т. 49, № 3. – С. 706-709.
- 9 Лайтфут Э. Явления переноса в живых системах. Биомедицинские аспекты переноса количества движения и массы: Пер. с англ. – М.: Мир, 1977. – 520 с.
- 10 Новосад З.И., Косов Н.Д. Эффективные коэффициенты диффузии трехкомпонентных газовых смесей гелия, аргона и углекислого газа // ЖТФ. – 1970. – Т. 40, № 11. – С. 2368-2375.
- 11 Andrew S.P.S. A simple Method of Measuring Gaseous Diffusion Coefficient // Chem. Eng. Sci. – 1955. – V. 4. – P. 269-272.
- 12 Жаврин Ю.И., Косов Н.Д., Белов С.М., Семидоцкая Н.И. О применении метода эффективных коэффициентов диффузии к диффузии в многокомпонентных газовых смесях при повышенных давлениях // Тепломассоперенос в жидкостях и газах. – Алма-Ата, 1982. – С. 3-12.
- 13 Калинин Б.А., Лойко А.Э., Суегин П.Е. Эффективная длина капилляра в измерениях коэффициентов взаимной диффузии газов методом двух объемов // Диффузия в газах и жидкостях. – Алма-Ата, 1972. – С. 79-85.
- 14 Бретшнайдер С. Свойства газов и жидкостей (инженерные методы расчета): Пер. с польского. – М.-Л.: Химия, 1966. – 536 с.
- 15 Богатырев А.Ф., Незовитина М.А. Температурная зависимость коэффициентов взаимной диффузии углеводородных газов // Актуальные вопросы исследований пластовых систем месторождений углеводородов: сб. науч. ст. – М: Газпром ВНИИГАЗ, 2014. – № 2 (18) – С. 55-58. – (Науч.-тех. сб. «Вести газовой науки»). Селезнев В.Д., Смирнов В.Г. Диффузия трехкомпонентной смеси газов в системе двух колб // ЖТФ. – 1981. – Т.51, № 4. – С. 795-800.
- 16 Берд Р., Стьюарт В., Лайтфут Е. Явления переноса: Пер. с англ. – М.: Химия, 1974. – 688с.

## References

- 1 N.D. Kosov, Ju.I. Zhavrin, Z.I. Novosad, *Teplofizicheskie svoystva veshhestv i materialov*, 17, 86-112, (1982). (in russ).
- 2 A.G. Bychkov, Ju.I. Zhavrin, *НИИ ЭТФ Каз.ун-т, Alma-Ata*, 10 s. Dep. V KazNIKI. 15.01.93. № 3985. Ка-93, (1993). (in russ).

- 
- 3 Ju.I. Zhavrin, N.D. Kosov, Z.I. Novosad, Diffuzija v gazah i zhidkostjah, Alma-Ata: MV i SSO KazSSR, 12-19, (1974). (in russ).
  - 4 Ju.I. Zhavrin, V.Ju. Zhavrin, V.N. Kosov, I.V. Pojarkov, Vestnik KazNU, ser. Fizicheskaja, 2 (22), 73-79 (2006). (in russ).
  - 5 Ju.I. Zhavrin, V.N. Kosov, I.V. Pojarkov, O.V. Fedorenko, M.K. Asembaeva, Vestnik KazNU, serija fizicheskaja, 1(36), 71-75 (2001). (in russ).
  - 6 Ju.I. Zhavrin, V.N. Kosov, M.K. Asembaeva, I.V. Pojarkov, O.V. Fedorenko, Izvestija NAN RK, serija fiz.-mat., 3(277), 41-47, (2011). (in russ).
  - 7 G.A. Tirskij, PMM, 1, 180-182, (1969). (in russ).
  - 8 Ju.I. Zhavrin, N.D. Kosov, Z.I. Novosad, ZhFH, 49(3), 706-709, (1975). (in russ).
  - 9 Je. Lajftut Javlenija perenosy v zhivyh sistemah. Biomeditsinskie aspekty perenosy kolichestva dvizhenija i massy: Per. s angl. – M.: Mir, 1977, 520. (in russ).
  - 10 Z.I. Novosad, N.D. Kosov, ZhTF, 40(11), 2368-2375, (1970). (in russ).
  - 11 S.P.S. Andrew, Chem. Eng. Sci., 4, 269-272, (1955). (in russ).
  - 12 Ju.I. Zhavrin, N.D. Kosov, S.M. Belov, N.I. Semidockaja, Teplomassoperenos v zhidkostjah i gazah. – Alma-Ata, 1982. 3-12. (in russ).
  - 13 B.A. Kalinin, A.Je. Lojko, P.E. Suetin, Diffuzija v gazah i zhidkostjah. – Alma-Ata, 1972. –79-85. (in russ).
  - 14 S. Bretshnajder Svoystva gazov i zhidkostej (inzhenernye metody rascheta): Per. s pol'skogo. – M.-L.: Himija, 1966. – 536 s. (in russ).
  - 15 A.F. Bogatyrev, M.A. Nezovitina, Aktual'nye voprosy issledovanij plastovyh sistem mestorozhdenij uglevodorodov: sb. nauch. st. – M: Gazprom VNIIGAZ, 2(18), 55-58, (2014). (Nauch.-teh. sb. «Vesti gazovoj nauki»). V.D. Seleznev, V.G. Smirnov, ZhTF, 51(4), 795-800, (1981). (in russ).
  - 16 R. Berd, V. St'juart, E. Lajftut Javlenija perenosy: Per. s angl.- M.: Himija, 1974.- 688.



### Технология переработки углеродсодержащих отходов

На сегодняшний день рост численности населения на планете и интенсификация человеческой деятельности в связи с научно-технической революцией неминуемо приводят к резкому росту антропогенного влияния на природу. Антропогенное воздействие превышает регенерационные возможности природной среды. Настоящая статья представляет собой обзор технологий переработки различных отходов. На начальном этапе большинство образующихся отходов проходят всевозможную сортировку на полезное вторичное сырье (металл, стекло, бумагу, полимеры и пластики) и утилизируемую органическую часть. Сортировке подвергают промышленные и бытовые отходы, которые можно идентифицировать. Однако существует ряд опасных отходов, которые не подвержены сортировке. К ним относятся медико-биологические и радиоактивные отходы. Современные технологии позволяют не только уничтожить опасные отходы, но и получить материальные и энергетические ресурсы. Наиболее перспективной из них является высокотемпературная плазменная переработка отходов. Она является практически единственной технологией переработки отходов, гарантирующей уничтожение опасных биологических, биохимических, химических продуктов и супертоксикантов – бенз(а)пиренов, фуранов, диоксинов и диоксиноподобных веществ. Плазменная газификация углеродсодержащих отходов обеспечивает получение высококалорийного и экологически чистого синтез-газа. Синтез-газ может быть использован в качестве энергетического газа, исходного реагента для синтеза синтетических жидких топлив и экономичного энергоносителя для современных электрогенераторов. Оставшаяся зола перерабатывается в гранулированный шлак или керамическую плитку.

**Ключевые слова:** углеродсодержащие отходы, плазменная переработка, термическая переработка, пиролиз, синтез-газ, обезвреживание отходов, компостирование, диоксины, фураны, бенз(а)перены.

### Technology for processing carbon-containing waste

Today, population growth on the planet and the intensification of human activities in connection with the scientific and technological revolution inevitably leads to a sharp increase in the anthropogenic impact on the environment. Human impact exceeds the regeneration capabilities of the natural environment. This article is review of technologies for processing of different waste. Initially, all kinds of waste sorting on secondary raw materials (metal, glass, paper, plastics and polymers) and utilized organic part. Sorting is subjected to industrial and municipal waste that can be identified. However, there are a number of hazardous wastes that are not subject to sorting. These include biomedical and radioactive waste. Modern technologies make it possible not only to destroy hazardous waste, but also to get the material and energy resources. The most promising of them is high-temperature plasma processing of waste. It is practically the only waste processing technology that guarantees the destruction of dangerous biological, biochemical, chemical products and super toxicants – benz(a)pyrene, furans, dioxins and dioxin-like substances. Plasma gasification of carbonaceous waste produces high-energy and environmentally friendly synthesis gas. Synthesis gas can be used as an energy gas, a raw reagent for the synthesis of synthetic liquid fuels and an economical energy carrier for modern power generators. The remaining ash is processed into granular slag or ceramic tile.

**Key words:** carbonaceous waste, plasma processing, thermal treatment, pyrolysis, synthesis gas, disposal of waste, composting, dioxins, furans, benz(a)pyrene.

### Құрамында көміртегі бар қалдықтарды өңдеу технологиясы

Бүгінгі таңда ғылыми және технологиялық революцияға байланысты жер бетінде адам қызметінің қарқындап, халық санының өсуіне алып келді. Бұл сәйкесінше, қоршаған ортаға антропогендік әсердің күрт өсуіне әкеледі. Антропогендік әсер, қоршаған ортаның қайта қалпына келу мүмкіншілігімен салыстырғанда жоғары. Бұл мақала көміртегі бар қалдықтарды қайта өңдеу технологиясына арналған. Бастапқыда, пайда болған қалдықтар металл, шыны, қағаз, пластик және полимерлер түрінде сұрыпталады. Сұрыптау тек қана құрамы анықталатын қалдықтар үшін жүргізіледі. Көп жағдайда, бұл өндірістік және тұрмыстық қалдықтар. Алайда, құрамын анықтау қиын және қауіпті бірқатар қалдықтар кездеседі. Бұл қатарға көп жағдайда биомедициналық қалдықтар жатады. Қазіргі заманғы технологиялар қауіпті қалдықтарды жоюмен қатар, материалдық және энергетикалық ресурстарды бөліп алуға мүмкіндік береді.

**Түйін сөздер:** көміртекті қалдықтар, плазмалық өңдеу, термиялық өңдеу, пиролиз, синтез-газ, қалдықтарды залалсыздандыру, компостерлеу, диоксиндер, фурандар, бензоперендер.

## **ТЕХНОЛОГИЯ ПЕРЕРАБОТКИ УГЛЕ- РОДСОДЕРЖАЩИХ ОТХОДОВ**

### **Введение**

В природных экосистемах отходы не накапливаются, а разлагаются и рециклируются, т.е. осуществляется круговорот биогенов. Человечество раньше избавлялось от отходов, используя регенерационные возможности природной среды. Но демографический взрыв и научно-технический прогресс привел к тому, что в окружающую среду поступает такое огромное количество отходов, которое превосходит возможности естественных экосистем. Важным звеном в круговороте веществ в живой природе являются детритофаги (животные, простейшие, водоросли и грибоподобные организмы), усиливающие доступность органических веществ для переработки бактериями. В экосистемах детритофаги выполняют роль консументов (организмы, потребляющие готовые органические вещества), как и животные, питающиеся «живой» органикой. От остальных консументов детритофаги отличаются тем, что не уменьшают продукцию своих ресурсов. Существуют переходы между детритофагами и редуцентами (бактериями и грибами), а также переходы между детритофагами, которые питаются мертвым веществом, и консументами, которые потребляют поселяющиеся на детрите бактерии и грибы. Проблему нейтрализации отходов усугубляет производство все большего количества вредных веществ (видов и объемов), которые не разрушаются или разрушаются очень медленно в результате естественных процессов (в природе нет соответствующих детритофагов и редуцентов). Чтобы удовлетворить ежегодные потребности каждого живущего на земле человека в пище, одежде, жилье, обеспечить его культурные и эстетические потребности, используется примерно 20 т различного природного сырья. Добыча полезных ископаемых удваивается во всем мире каждые 15 лет. Соответственно с этим увеличиваются и объемы отходов, которые условно можно разделить на промышленные и бытовые.

### **Методы переработки отходов**

Накапливание промышленных и бытовых отходов является наиболее серьезной экологической проблемой, стоящей перед

человечеством. Они в большинстве случаев обладают такими нежелательными свойствами, как токсичность, канцерогенность, мутагенность, коррозионность, реакционная способность, пожароопасность.

Существуют множество различных способов утилизации промышленных и бытовых отходов [1-6]. На начальном этапе некоторая часть отходов идет на вторичную переработку, однако большая их часть подвергаются различным методам утилизации и обезвреживания. Каждый из этих методов имеет свои преимущества и недостатки и применяется в зависимости от химического состава отходов, физических свойств и степени вредного действия на окружающие экосистемы. К наиболее распространенным методам утилизации отходов относятся:

1. Захоронение отходов – изоляция отходов, не подлежащих дальнейшему обезвреживанию или использованию (утилизации), путем помещения их в специальные хранилища без возможного извлечения в целях предотвращения попадания вредных веществ в окружающую природную среду.

2. Утилизация и обезвреживание отходов методом нейтрализации. Одним из ярких методов нейтрализации является компостирование и нейтрализация кислот и щелочей, которые нейтрализуют друг друга.

3. Термическая переработка (сжигание) – наиболее распространенный вид переработки отходов. Благодаря тому, что большая часть отходов легко подвергается термическому уничтожению, в результате применения этого метода происходит значительное уменьшение их начального веса и объема.

Несмотря на преимущества и недостатки, каждый из этих методов имеет право на существование.

Промышленные и бытовые отходы, поддающиеся идентификации, проходят различные стадии сортировки на специализированных мусоросортировочных заводах для выделения легко утилизируемых категорий мусора: вторичного сырья и органической части. Оставшаяся часть отходов проходит процесс обезвреживания с последующим захоронением. В большинстве случаев обезвреживание отходов происходит методом прямого сжигания, которое с экологической точки зрения, играет весьма спорную роль в системе уничтожения отходов и сохранении экосистемы.

Известно, что при производстве различных лекарственных препаратов образуются не только

подлежащие дальнейшей утилизации вещества и продукты, но и разнообразные отходы: токсичные маточные растворы, кубовые остатки, фильтровальные ткани, активированный уголь и другие. Большое количество разнообразных отходов образуется в госпиталях и больницах в результате оказания медицинской помощи больным и как результат обслуживания медицинских приборов и оборудования. Это могут быть пищевые отходы и перевязочные материалы, в том числе содержащие микробы и вирусы, а также различные виды отходов, содержащие использованные терапевтические медикаменты, в том числе с радиоактивными элементами, такими как  $^{14}\text{C}$ ,  $^{35}\text{P}$ ,  $^{60}\text{Co}$ ,  $^{90}\text{Sr}$ ,  $^{137}\text{Cs}$  и другие. Среди перечисленных видов отходов 50 – 60 % по объему составляют жидкости, 10 – 20 % – газы и 20 – 30 % – твердые вещества.

Данная проблема осложняется тем, что уже накопленные и хранящиеся твердые медицинские отходы, как правило, не отсортированы и в ряде случаев имеют весьма сложный состав, неподдающийся точной идентификации. В таких случаях этот состав подвергается всевозможной термической переработке.

К термической переработке отходов можно отнести:

- сжигание,
- низкотемпературный пиролиз,
- высокотемпературный пиролиз (плазменная переработка).

Преимуществом сжигания является то, что оно подходит для некоторых острых инфицированных, токсичных, фармацевтических отходов, цитостатиков. Во многих случаях сжигание является единственно возможным способом обезвреживания промышленных и бытовых отходов. При этом необходимо наличие высокоэффективной системы очистки газодымового выброса для устранения токсичных выбросов. После сжигания значительно сокращается объем и вес отходов.

Главным недостатком данного метода является образование и выброс сажи, токсичных и пахнущих веществ, летучей золы, диоксинов, фуранов, бенз(а)пирена, тяжелых металлов, полиароматических углеводородов (при неэффективной системе очистки газодымовых выбросов). Острые и колющие отходы сохраняют риск физического поражения. Большую часть полимерных отходов, для предотвращения образования токсичных соединений и запаха, сжигать нельзя. Этот метод неприменим для многих видов фармацевтических и химических отходов.

Недостатком метода является также то, что требуется дорогостоящая система очистки газовых выбросов.

Для огневого обезвреживания отходов широко применяются промышленные тепловые агрегаты, такие как асфальтовые или цементные печи, паровые котлы, циркуляционные печи с псевдоожиженным слоем, вращающиеся обжиговые печи. При температуре в таких печах и устройствах 1000-1200 °С, дожигание образующихся летучих органических соединений проводят во вторичных камерах с дополнительной подачей топлива и окислителя. В некоторых случаях для повышения температуры в горелках воздух обогащают кислородом.

Проведенные исследования, требуют критического отношения к огневому обезвреживанию токсичных отходов в связи с возможностью вторичных процессов образования чрезвычайно вредных соединений: диоксинов, фуранов и бенз(а)пирена [2, 4]. Недостатком огневого обезвреживания является также использование дополнительного топлива (обычно природного газа), что значительно увеличивает объемы отходящих газов, а соответственно значительно возрастает нагрузка на систему газоочистки, ее размеры, материалоемкость и стоимость.

Для низкотемпературного пиролиза характерны максимальный выход жидких и твердых (полукокс) остатков и минимальный выход пиролизного газа с максимальной теплотой сгорания. Метод подходит для получения первичной смолы – ценного жидкого топлива, и для переработки некондиционного каучука в мономеры, являющиеся сырьем для вторичного создания каучука [3].

Преимущество пиролиза, по сравнению с непосредственным сжиганием отходов заключается, прежде всего, в его эффективности с точки зрения предотвращения загрязнения окружающей среды. С помощью пиролиза можно перерабатывать компоненты отходов, неподдающиеся утилизации, такие как автопокрышки, пластмассы, отработанные масла, отстойные вещества.

Пиролиз применим для переработки анатомических и инфекционных отходов и их эффективного обезвреживания. При пиролизе отходов достигается сокращение объема и массы (более чем на 95 %). Можно осуществлять рекуперацию тепла. Запахи и дым не образуются. Без доступа воздуха – нет условий для образования диоксинов и прочих токсичных веществ. Пиролиз неприменим для фармацевтических, хими-

ческих, токсичных отходов, т.к. осуществляется неполное разрушение цитостатиков.

Плазменная переработка отходов (твердых бытовых, медицинских и опасных отходов) это новый способ утилизации опасных отходов, который по существу, представляет собой газификацию отходов [3-6]. Данный способ является наиболее перспективным, поскольку технологическая схема подобного производства не предъявляет каких-либо жестких требований к исходному сырью и позволяет получить вторичную энергию в виде нагретого водяного пара или горячей воды. Плазменная газификация углеродсодержащих отходов может обеспечить получение высококалорийного и экологически чистого синтез-газа ( $\text{CO} + \text{H}_2$ ). Отношение  $\text{H}_2/\text{CO}$  в синтез-газе можно регулировать исходным составом рабочей смеси (отходы + окислитель) и температурой процесса газификации. Полученный газ может быть использован в качестве высококалорийного энергетического газа, исходного реагента для синтеза синтетических жидких топлив, а также экономичного энергоносителя для электрогенераторов на основе твердооксидных топливных элементов. Оставшаяся зола может быть переработана в гранулированный шлак или керамическую плитку.

По сути, это и есть оптимальный вариант комплексной переработки отходов, представляющий собой полную экологически чистую утилизацию отходов с получением тепловой энергии и различных полезных продуктов из самого «бросового» сырья – бытового мусора.

## Выводы

Низкие экологические показатели и ограниченное число отходов, состав которых приемлем для использования в существующих печах, приводят к поискам и разработкам новых технологий утилизации отходов.

Проблема полного уничтожения токсичных отходов актуальна, прежде всего, с точки зрения отрицательного воздействия их на окружающую среду. Из известных способов наименьший вред окружающей среде наносит высокотемпературный (плазменный) метод переработки отходов. Основой данной технологии является плазменный термохимический окислительный пиролиз органической части отходов (высокотемпературная газификация) с образованием горючих компонентов, а неорганическая часть при этом переводится в инертный расплав и остекловывается. Проведенные

исследования и испытания показали высокую эффективность плазменной технологии переработки отходов различного происхождения, таких как отработанные автомобильные шины, осадки сточных вод, металлургические шлаки, зола и шлаки после сжигания твердого топлива и бытовых отходов, металлическая стружка, медицинские и ветеринарные отходы, включая инфицированный материал, пестициды и другие ядохимикаты с истекшим сроком годности, асбестсодержащие материалы, стойкие органические загрязнители, отходы растворителей лакокрасочных изделий, загрязненные почвы,

смешанные отходы, отходы нефтепереработки, радиоактивные отходы, отравляющие и взрывчатые вещества. Таким образом, практически все виды отходов, образующиеся в различных сферах производства, могут быть подвержены плазменной переработке.

Высокотемпературная плазменная переработка отходов – это практически единственная технология переработки отходов, гарантирующая уничтожение опасных биологических, биохимических, химических продуктов и супертоксикантов – бенз(а)пиренов, фуранов, диоксинов и диоксиноподобных веществ.

### Литература

- 1 Davidson G. Waste Management Practices: Literature Review. Dalhousie University – Office of Sustainability, 2011. – 59 p.
- 2 Обезвреживание отходов термическим способом (сжигание отходов) / Информационно-технический справочник по наилучшим доступным технологиям (ИТС 9 – 2015). Москва: Бюро НДТ. – 2015. – 249 с.
- 3 Мессерле В.Е., Моссэ А.Л., Устименко А.Б. Плазменная газификация углеродсодержащих отходов. Современная наука: исследования, идеи, результаты, технологии. – Выпуск 1 (16). – Днепропетровск: «НПВК Триакон», 2015. – С. 195-199.
- 4 Моссэ А.Л., Савчин В.В. Плазменные технологии и устройства для переработки отходов. – Минск: Беларуская навука, 2015. – 411 с. – ISBN 978-985-08-1856-0
- 5 Мессерле В.Е., Моссэ А.Л., Никончук А.Н., Устименко А.Б. Плазмохимическая переработка медико-биологических отходов. Инженерно-физический журнал. – 2015. – Т.88, № 6. – С. 1420-1424.
- 6 Аньшаков А.С., Фалеев В.А., Даниленко А.А., Урбах Э.К., Урбах А.Э. Исследование плазменной газификации углеродсодержащих техногенных отходов. Теплофизика и аэромеханика. – 2007. – Т. 14, № 4. – С. 639 – 650.

### References

- 1 G. Davidson, Waste Management Practices: Literature Review, Dalhousie University, Office of Sustainability, 59 p., 2011.
- 2 Neutralization of waste thermally (incineration) / Information and technical reference for the best available techniques (ITS 9 – 2015). Moscow: Bureau NDT, 2015, 249 p. (in russ).
- 3 V.E. Messerle, A.L. Mosse, A.B. Ustimenko, Modern science: investigations, ideas, results, technologies, 1 (16), 195-199, (2015).
- 4 A.L. Mosse, V.V. Savchin, Plasma technologies and devices for waste processing, Minsk: Belaruskaya navuka, ISBN 978-985-08-1856-0, 411 p., 2015. (in russ).
- 5 V.E. Messerle, A.L. Mosse, A.N. Nikonchuk, A. B. Ustimenko, Journal of Engineering Physics and Thermophysics, 88(6), 1471-1475. (in russ).
- 6 A.S. An'shakov, V.A. Faleev, A.A. Danilenko, E.K. Urbakh, A.E. Urbakh, Thermophysics and Aeromechanics, 14(4), 607–616, (2007). (in russ).





Максимов В.Ю., Айдабол С.К.,  
Отыншиева Н.А.

**Тепломассоперенос  
при горении угольной пыли  
в камере сгорания  
энергетического котла БКЗ-75  
Шахтинской ТЭЦ**

Представленная работа посвящена процессам тепло-массопереноса, происходящим при сжигании угольной пыли в камере сгорания действующего энергетического котла БКЗ-75 Шахтинской ТЭЦ, а также применению к таким процессам методов 3D компьютерного моделирования. Проведенные в данной работе исследования позволяют определить основные закономерности распределения аэродинамических и теплообменных характеристик во всем объеме топочной камеры котла БКЗ-75 Шахтинской ТЭЦ и на выходе из нее. В данной работе проведено сравнение компоновок горелочными устройствами исследуемой топочной камеры в случаях, когда: 1) используются прямоточные щелевые (базовый режим); 2) используются вихревые горелки с углом закрутки потока аэросмеси и наклоном их к центру симметрии котла на 30 градусов. Кроме того, проведенные в данной работе исследования позволили определить влияние аварийной остановки подачи угольной пыли в горелочные устройства топки на основные характеристики исследуемой камеры сгорания.

**Ключевые слова:** численное моделирование, камера сгорания, пылеугольное топливо, тепловые характеристики, температура, аэродинамика, теплообмен.

Maximov V.Ju., Aidabol S.K.,  
Otyunshyeva N.A.

**Heat and mass transfer in  
combustion of coal dust into  
the combustion chamber of  
the power boiler BKZ-75 of  
Shahtinskaya TPP**

The presented work is devoted to the processes of heat and mass transfer, which occur when burning of pulverized coal in the combustion chamber of the existing energetic boiler BKZ-75 of the Shakhtynskaya TPP and applied to such processes methods of 3D-computer simulation. Research which was conducted in this paper, allow determining the basic patterns of distribution of aerodynamic and heat-exchanging characteristics in all volume of the combustion chamber of the boiler BKZ-75 of Shakhtynskaya TPP and on an output from it. In this paper has been compared of configurations by burner devices of the combustion chamber in the following cases: 1) are used direct-flow slot-hole torches (the basic mode); 2) vortex burner with a swirling of aero mix and their inclination to the center a symmetry of a boiler by 30 degrees. In addition, conducted in this paper the researches allowed determining the influence of emergency stopping of supply of a coal dust in burners on the main characteristics of the combustion chamber.

**Key words:** numerical simulation, combustion chambers, pulverized coal, thermal characteristics, temperature, aerodynamics, heat transfer.

Максимов В.Ю., Айдабол С.К.,  
Отыншиева Н.А.

**ЖЭО Шахтинскідегі БКЗ -75  
энергетикалық қазандықтың  
жану камерасындағы  
көмір тозаңының жануы  
барысындағы жылу және мас-  
са тасымалы**

Ұсынылып отырған жұмыс Шахтинскідегі ЖЭО-ның іске қосылған БКЗ-75 энергетикалық қазандығының жану камерасында көмір шаңтозаңын жағу барысында жүретін жылумассатасымал үрдістеріне және де мұндай үрдістерге 3D-компьютерлік модельдеу әдістерін қолдануды зерттеуге арналған. Берілген жұмыста жүргізілген зерттеулер Шахтинскідегі ЖЭО-ның БКЗ-75 қазандығының жану камерасының барлық көлемінде және оның шығысындағы аэродинамикалық және жылуалмасу сипаттамаларының тарауының негізгі заңдылықтарын анықтауға мүмкіндік береді. Осы жұмыста зерттелетін жану камерасын жанарғы құралдарымен қамтудың келесі жағдайларына салыстыру жүргізіледі: 1) тікнүктелі саңылаулар қолданылады (негізгі режим); 2) аэроқоспа ағынын айналдыру және оларды қазандық симметрия центріне 30 градусқа еңкейту бұрышы бар құйынды жанарғылар қолданылады. Сонымен қатар, орындалған зерттеу жұмыстары зерттелетін жану камерасының негізгі сипаттамаларына жағатын жанарғы қондырғыларға көмір шаңтозаңының берілуінің апаттық тоқтауының әсерін анықтауға мүмкіндік береді.

**Түйін сөздер:** сандық модельдеу, жану камерасы, шаңкөмірлі алау, жылулық сипаттамалар, температура, аэродинамика, жылу алмасу.

**ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОС  
ПРИ ГОРЕНИИ  
УГОЛЬНОЙ ПЫЛИ  
В КАМЕРЕ СГОРАНИЯ  
ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО  
КОТЛА БКЗ-75  
ШАХТИНСКОЙ ТЭЦ**

**Введение**

Сектор энергетики Казахстана является одним из развитых секторов экономики. Первостепенной задачей теплоэнергетики является снижение затрат на получение необходимой продукции. Для создания, выбора и эксплуатации энергоресурсов, технологических энергетических процессов необходимо применение точных расчетных методик теплоэнергетических процессов. Темпы научно-технического прогресса, организация общественного производства, улучшение условий труда и решение многих социальных проблем в значительной мере определяются уровнем использования энергетических ресурсов. Развитие топливно-энергетического комплекса и энергетики является одной из важнейших основ развития всего современного материального производства [1-3].

В связи с этим, становится актуальным вопрос выбора, эксплуатации, а в первую очередь, создания новых, высокоэффективных энерго- и ресурсосберегающих технологий энергетических процессов. Для этого необходима реализация целого комплекса мероприятий, важнейшим из которых является применение наиболее точных методик расчета теплоэнергетических процессов [2].

Экспериментальные исследования, проводимые на натуральных промышленных объектах, дают ценные сведения о работе энергетического объекта в целом, но при этом возможность исследовать влияние отдельных факторов на формирование и развитие топочных процессов отсутствует. Значительно больше возможностей открывают исследования, проводимые на стендовых установках [4].

В настоящий момент единственным средством в реализации комплексного исследования процессов сжигания пылеугольного топлива в топочных камерах котлов промышленных объектов (ТЭС, ТЭЦ, и др.) являются численные методы и вычислительный эксперимент с использованием методов трехмерного моделирования и привлечением современного компьютерного оборудования вычислительной техники и пакета программ. Преимущество 3D- моделирования заключается в том, что учитывается наибольшее количество явлений и факторов, влияющих на протекание реальных процессов.

В настоящее время наблюдается повышенный интерес к исследованию процессов тепло-массопереноса в высокотемпературных средах при наличии в них горения. Эти процессы протекают в условиях сильной неизомерности и турбулентности течения, многофазности среды, существенного влияния нелинейных эффектов теплового излучения, межфазного взаимодействия и многостадийности протекающих при этом химических реакций [5-7]. Такие явления широко распространены, играют важную роль в теплофизических процессах, и их изучение является актуальной задачей макрокинетики, физики горения и взрыва и современной теплофизики.

Сказанное выше говорит об актуальности поставленной задачи, а использование современных технологий численного метода исследования и методики трехмерного моделирования позволило провести комплексное исследование тепловых процессов и аэродинамических характеристик топочной камеры котла действующего казахстанского энергетического объекта.

Результаты, проведенные в работе, позволили определить оптимальные технологические параметры исследуемого объекта, усовершенствовать методологию численного исследования процессов тепло-массопереноса в высокотемпературных и химически реагирующих потоках при наличии турбулентности, а также выработать соответствующие технологические решения для аэродинамических характеристик исследуемой камеры сгорания.

### Численное моделирование

В данной работе, с использованием методов трехмерного моделирования были проведены вычислительные эксперименты по исследованию теплообменных характеристик топочной камеры БКЗ-75 Шахтинской ТЭЦ. Авторами разработаны и применены геометрическая, физико-математическая и химическая модели тепло-массопереноса в неоднородных пылеугольных турбулентных потоках в процессе сжигания пылеугольного топлива в топочной камере энергетического котла.

При разработке вышеуказанных моделей были использованы начальные и граничные условия, отражающие реальные физические и технологические процессы, происходящие в камере сгорания котла БКЗ-75 Шахтинской ТЭЦ.

На рисунке 1 представлена конечно-разностная сетка топочной камеры котла БКЗ-75 Шахтинской ТЭЦ.

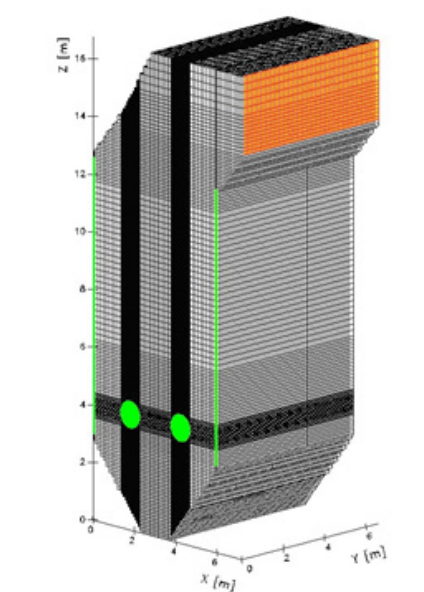


Рисунок 1 – Конечно-разностная сетка топочной камеры

Исследуемый в данной работе котельный агрегат блочной конструкции, предназначен для работы на бурых и каменных углях, торфе, антрацитовом штыбе и тощих углях, является однобарабанным, с естественной циркуляцией и выполнен по П-образной схеме. Топочная камера котла БКЗ-75 Шахтинской ТЭЦ полностью экранирована трубами диаметром 60 мм и толщиной стенки 3 мм. Трубы фронтного, заднего экранов и нижней части образуют холодную воронку.

Как было сказано ранее, в работе проведено сравнение компоновок горелочными устройствами исследуемой топочной камеры в случаях, когда: 1) используется прямоточные щелевые – базовый режим (Рис. 2, а); 2) используются вихревые горелки с углом закрутки потока аэро-смеси и наклоном их к центру симметрии котла на 30 градусов (Рис. 2, б).

Кроме того, проведенные в данной работе исследования позволили определить влияние аварийной остановки подачи угольной пыли в горелочные устройства топки (Рис. 2, в) на основные характеристики камеры сгорания исследуемого котла.

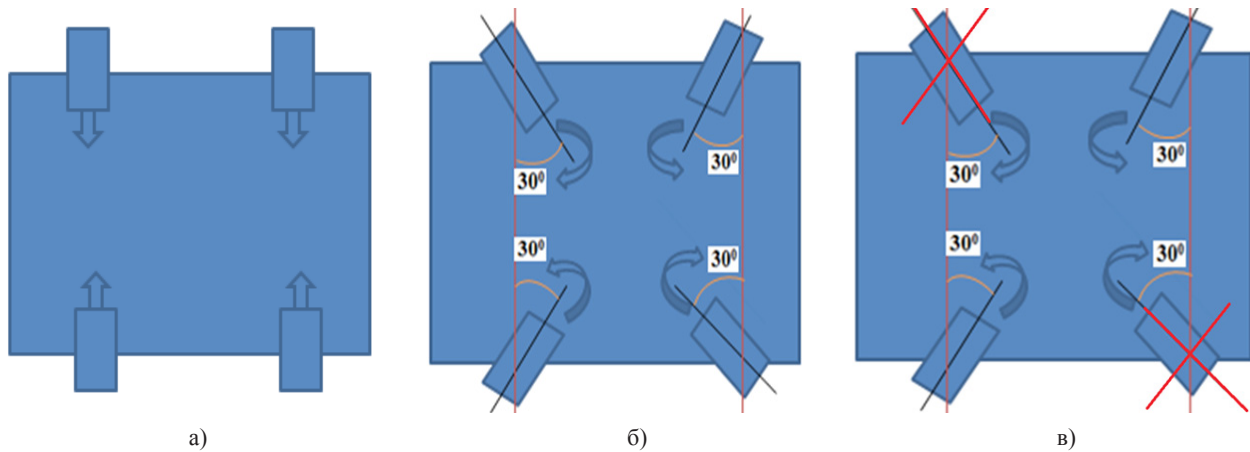
По результатам вычислительных экспериментов были построены распределения вектора полной скорости для указанных случаев (Рис. 3).

Как видно из Рис. 3, а, в области пояса горелочных устройств четыре закрученных потока, направляющиеся из вихревых горелок соударяются между собой в центральной части камеры

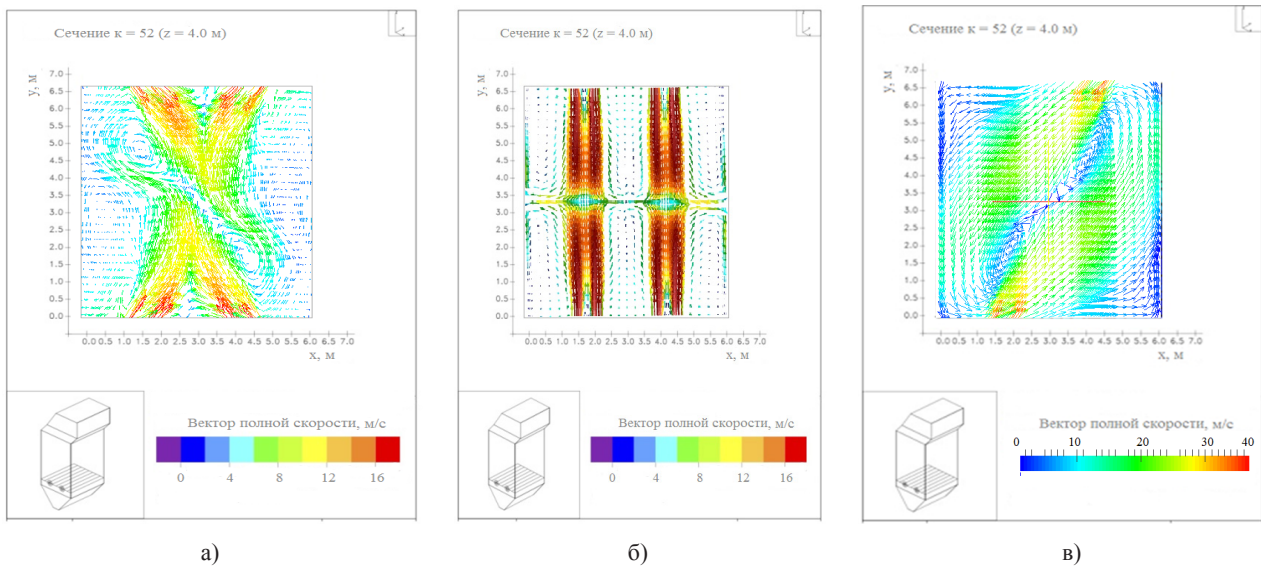
сгорания под углом 30 градусов. Далее, объединившись в два основных потока, они рассекаются, образуя вихревые области больше в горизонтальной области камеры сгорания.

Данная аэродинамическая картина кардинальным образом отличается от случая, когда

камера сгорания комплектуется прямоточными щелевыми горелками (Рис. 3, б), где потоки, соударяясь в центре под прямым углом, рассекаются в область холодной воронки и к выходу из камеры сгорания, с образованием вихревого течения меньшей интенсивности.



**Рисунок 2** – компоновка горелочными устройствами топочной камеры котла БКЗ-75: а) прямоточными горелками; б) вихревыми горелками; в) при аварийном режиме



**Рисунок 3** – Распределение вектора полной скорости в области установки горелочных устройств при: а) вихревом способе подачи аэросмеси; б) прямоточном способе подачи аэросмеси; в) аварийном режиме

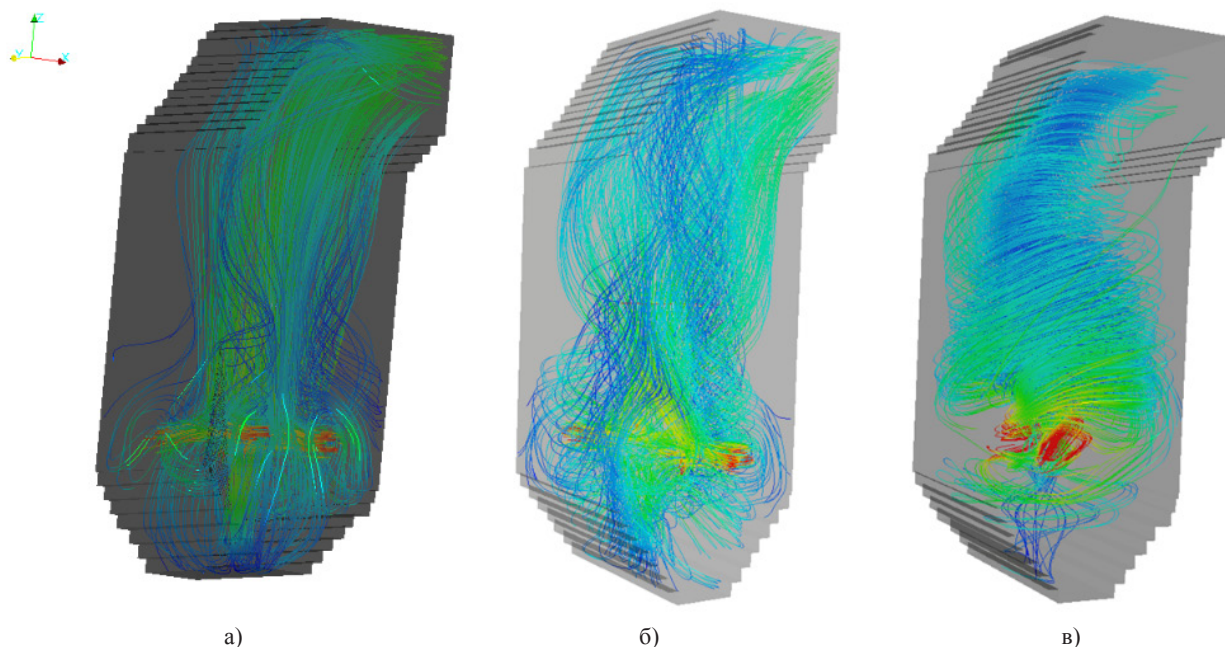
Анализ рисунка 3, в показывает, что в области пояса горелочных устройств потоки, направляющиеся из горелок, соударяются в центре топочной камеры, образуя при этом течение, имеющее интенсивный вихревой характер. По-

сле соударения потоки аэросмеси направляются вихревым образом к выходу из топочной камеры.

Также в ходе вычислительного эксперимента были построены распределения траекторий полета

угольных частиц и потока окислителя в топочной камере: а) с установленными прямооточными горелками; б) вихревыми горелками; в) в аварийном режиме (рисунок 4). Из рис. 4, а видно, что при организации процесса сжигания угольной пыли с по-

мощью прямооточных щелевых горелок в области холодной воронки образуется вертикальное вихревое течение, препятствующее распространению аэросмеси по всему объему топочной камеры, тем самым «задерживая» основной поток.



**Рисунок 4** – Распределение траекторий полета угольных частиц в топочной камере: а) с установленными прямооточными горелками; б) вихревыми горелками; в) при аварийном режиме

Данная проблема решается применением вихревых горелок и наклоном их к центру симметрии на 30 градусов. Так, из рисунка 4, б мы наблюдаем турбулентный поток аэросмеси, растекающийся по всему объему топочной камеры, без задержки его в области холодной воронки. Это благоприятно сказывается на распределении тепловых характеристик исследуемой камеры сгорания. Кроме того, на рисунке 4, в представлена аэродинамика потоков в исследуемой топочной камере при организации в ней аварийного режима.

Каждая химическая реакция, протекающая в топочной камере, сопровождается выделением или поглощением определенного количества энергии [8-10]. Распределение кинетической энергии турбулентности, выделяемой при горении пылеугольного топлива в топочном пространстве, представлено на рисунке 5.

Вихревой областью с наибольшими изменениями скоростей, их пульсаций и областью с наиболее интенсивно происходящими процес-

сами физико-химических превращений пылеугольного топлива, является центральная часть области установки горелочных устройств для всех исследуемых случаев. В этой части топочной камеры реакции окисления топливных компонент идут с наибольшей скоростью. В частности, кинетическая энергия турбулентности, достигает своих максимальных значений в области пояса горелочных устройств на высоте четырех метров, поскольку эта область является зоной столкновения пылеугольных потоков, которая обусловлена нестационарным возмущением закрученного течения и в которой наблюдается резкий скачок турбулентных пульсаций.

Профили температуры, характеризующие тепловое поведение пылеугольного потока в камере сгорания для трех случаев приведены на рисунке 6. Видно, что во всех случаях температура достигает своих максимальных значений в области, близкой к месту расположения горелочных устройств. Это связано с вихревым характером

течения, в результате чего наблюдается максимальный конвективный перенос и, как результат, увеличивается время пребывания угольных частиц, что приводит к росту температуры.

В случае использования щелевых горелочных устройств область максимальных значений температуры, вследствие аэродинамической картины, располагается вблизи экранов камеры

сгорания, что вызывает их дополнительную тепловую нагрузку. Иным образом наблюдается область максимальных значений температуры в случае использования вихревых горелок с углом закрутки 30 градусов. В данном случае ядро факела наблюдается в центре камеры сгорания, тем самым снижается тепловая нагрузка вблизи экранов.

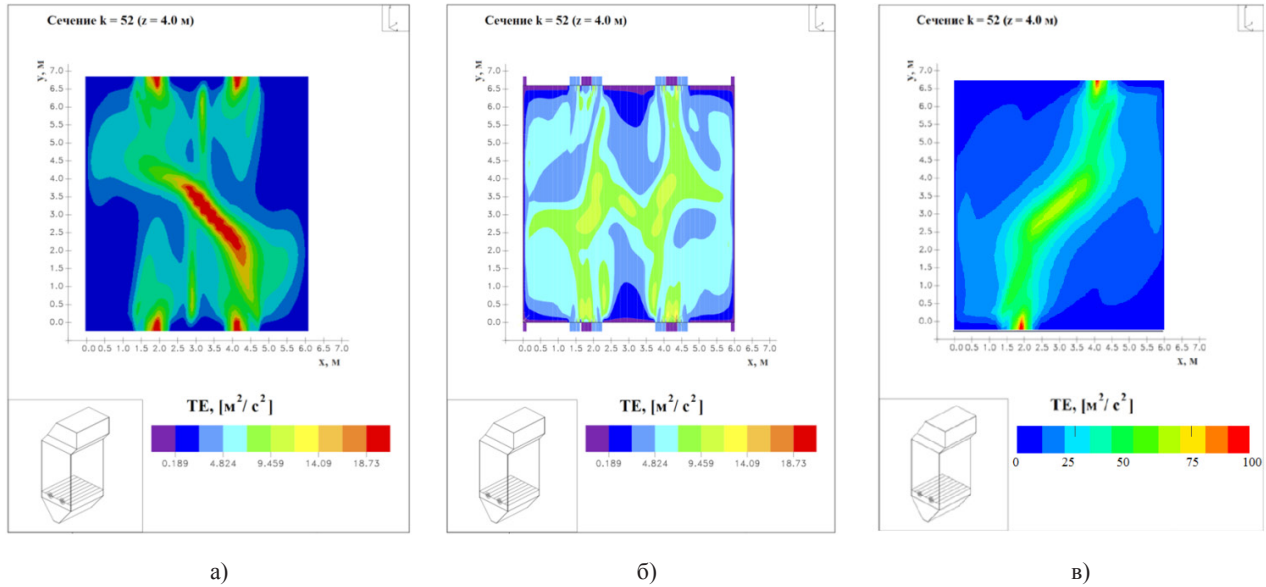


Рисунок 5 – Распределение кинетической энергии турбулентности в сечении установки: а) вихревых горелок; б) прямооточных горелок; в) при аварийном режиме

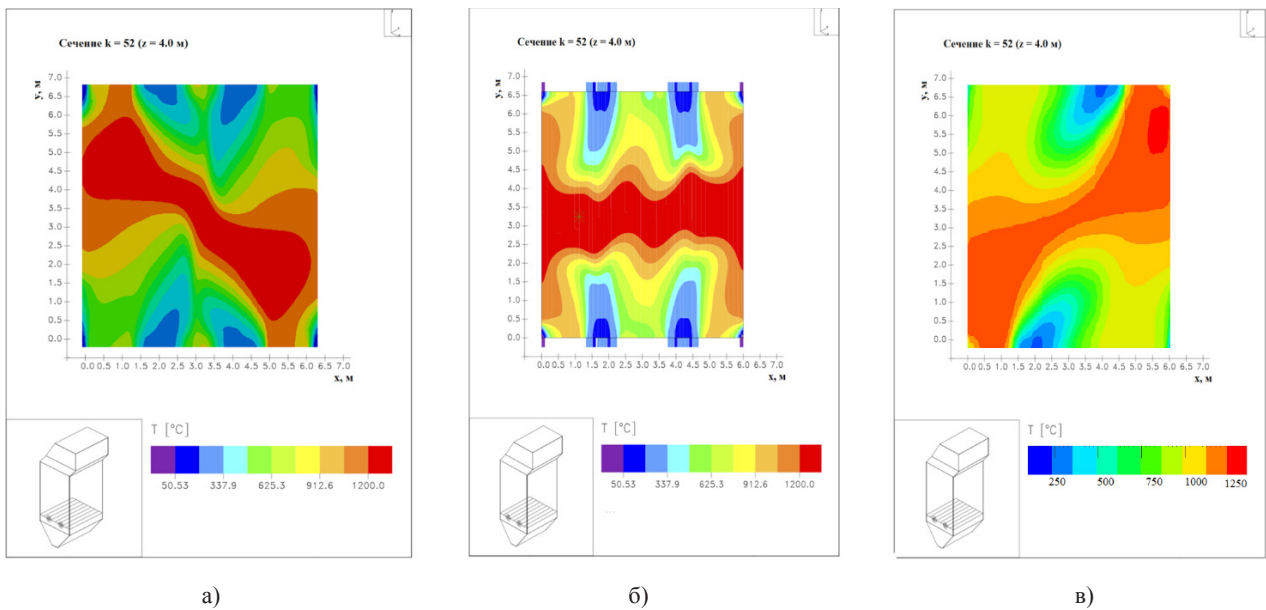
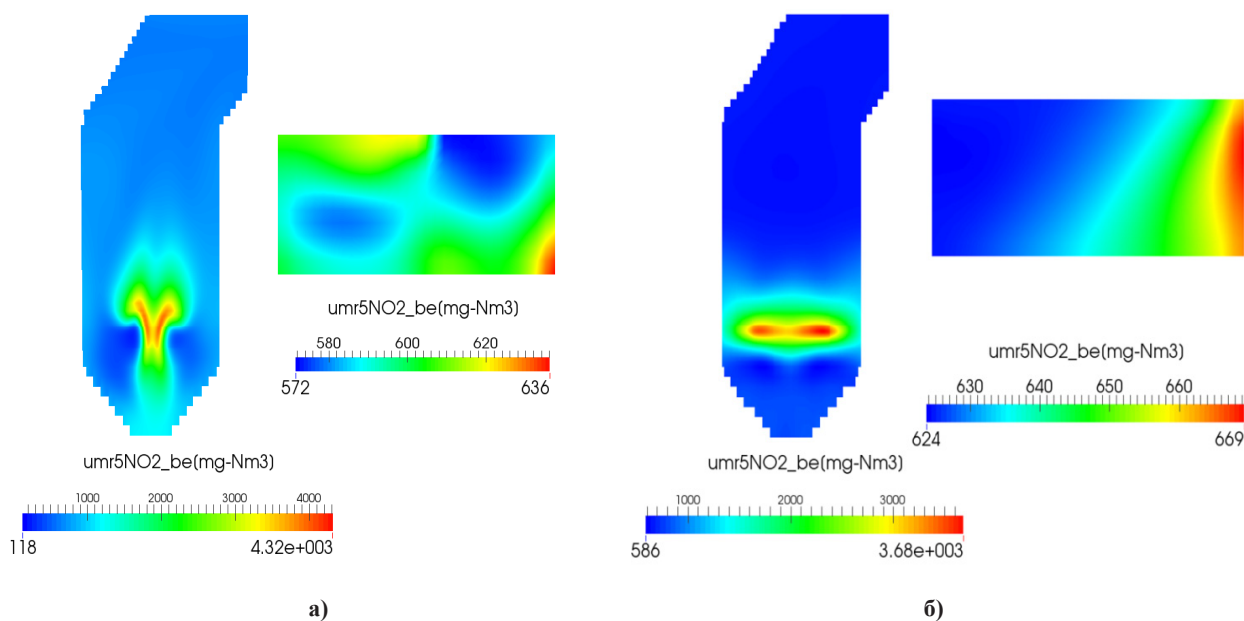


Рисунок 6 – Распределение температуры в сечениях установки: а) вихревых горелок; б) прямооточных горелок; в) при аварийном режиме

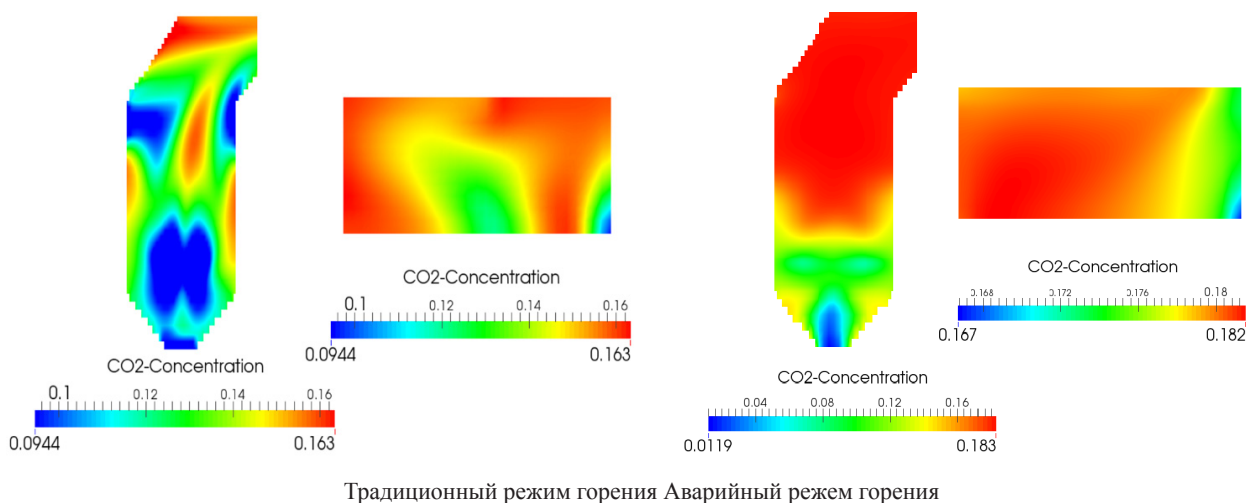
Горение энергетического топлива сопровождается образованием вредных для окружающей среды пылегазовых выбросов, количество которых в каждом конкретном случае зависит от технологии и режимов сжигания угольной пыли, а также от ее состава [11-12]. К наиболее важным, поступающим в атмосферу при сжигании в топочных камерах пылеугольного топлива, загрязнителям относятся газодые выбросы (оксиды азота, углерода).

Картина распределения концентрации вредных пылегазовых выбросов показана на ри-

сунках 7-8. Анализ показывает, что зоной максимального образования диоксида азота,  $NO_2$ , является область высоких температур и интенсивного вихревого течения. Для исследуемой топочной камеры такая область находится в зоне расположения вихревых горелочных устройств на высоте  $z = 4.0$  м. Интенсивное перемешивание топлива и окислителя, создаваемое турбулентными потоками впрыскиваемой аэроsmеси вблизи горелок, а также высокая температура в ядре факела, создают благоприятные условия для образования диоксидов азота.



**Рисунок 7** – Распределение концентрации диоксида азота в топочной камере в случае а) традиционного горения; б) при организации аварийного режима



**Рисунок 8** – Распределение концентрации углекислого газа в топочной камере



По мере прохождения пылеугольного факела к выходу из топочной камеры, наблюдается равномерное снижение концентрации  $\text{NO}_x$ , поскольку эта область содержит в себе меньше кислорода и компонент топлива.

В области пояса горелочных устройств на высоте 4 метра концентрация углекислого газа  $\text{CO}_2$  минимальная. По мере продвижения к выходу из топочной камеры растет и на выходе принимает максимальное значение, равное: ~16% – при базовом режиме и 18% при аварийном.

### Заключение

При использовании прямоточных и вихревых горелок аэродинамика исследуемой топочной камеры меняется кардинальным образом. Так, при использовании прямоточных горелочных устройств в сечении их установки наблюдается течение потока аэрозольной смеси с образованием мелких вихрей. Тогда как с использованием вихревых горелок мы видим иную картину: 4 закрученных потока, направляющиеся из вихревых горелок соударяются между собой в центральной части камеры сгорания под углом 30 градусов. Далее, объединившись в два основных потока, они растекаются, образуя вихревые области больше в горизонтальной области камеры сгорания.

Существенно то, что в случае использования щелевых горелочных устройств, вихревое течение образуется вблизи стенок камеры сгорания. Это говорит о том, что в данных областях температура будет достигать своих максимальных значений. С течением времени, при такой организации процесса горения пылеугольного топлива, стенки камеры сгорания будут «перегорать», что вызовет дополнительные конструкционные расходы. В противовес этому, при использовании вихревых горелок, вихревой областью течения является центральная часть камеры сгорания. Таким образом, угольная пыль будет большее

время пребывать в этой области, вдали от экранов, обеспечивая меньшие температуры возле них, тем самым снижая риск перегрева.

Кроме того, в случае использования прямоточных щелевых горелок в сечении холодной воронки образуется вихревое течение в вертикальной плоскости, тем самым «задерживая» поток аэрозольной смеси в этой области. Однако, в реальности, этого не должно происходить, поскольку ядро факела формируется в центральной части камеры сгорания.

Вихревой областью с наибольшими изменениями скоростей, их пульсаций и областью с наиболее интенсивно происходящими процессами физико-химических превращений пылеугольного топлива, является центральная часть области установки горелочных устройств. В этой части камеры сгорания реакции окисления топливных компонент идут с наибольшей скоростью, о чем свидетельствуют максимумы в распределении турбулентных характеристик процесса массообмена во всех исследуемых случаях.

Таким образом, полученные в данной работе результаты позволяют в полной мере изучить и лучше понять влияние сложных нелинейных эффектов: теплового излучения, межфазного взаимодействия, турбулентности, многофазности среды, многостадийности химических реакций, силы тяжести на процессы теплопереноса.

Результаты проведенных численных экспериментов помогут оптимизировать способы сжигания низкосортного казахстанского угля, и в то же время, создать концепцию производства энергии с минимальным количеством вредных веществ. Полученные результаты помогут энергетикам Казахстана решить важные экологические проблемы и достичь экономичного производства энергии.

*Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Республики Казахстан, Грант № 3481/ГФ4.*

### Литература

- 1 Askarova A., Bolegenova S., Maximov V., Beketayeva M., Safarik P. Numerical modeling of pulverized coal combustion at thermal power plant boilers // J. of Thermal Science. 2015. Vol. 24, Issue 3. P. 275–282.
- 2 Askarova A.S., Karpenko E.I., Lavrishcheva Y.I., Messerle V.E. et al. Plasma-supported coal combustion in boiler furnace // IEEE Transactions on Plasma Sci. 2007. Vol. 35, No. 6. P. 1607–1616.
- 3 Lockwood F., Shah N. An improved flux model for calculation of radiation heat transfer in combustion chambers // ASME–Paper. Salt Lake City. 1976. P.2–7.
- 4 Askarova A.S., Buchmann M.A. Structure of the flame of fluidized-bed burners and combustion processes of high-ash coal // 18th Dutch-German Conf. on Flames, Germany, 1997. Vol. 1313. P. 241–244.

- 5 Leithner R. Energy conversion processes with intrinsic CO<sub>2</sub> separation // Transactions of the Society for Mining, Metallurgy and Exploration. 2005. Vol. 18. P. 135-145.
- 6 Müller H. Numerische Berechnung dreidimensionaler turbulenter Strömungen in Dampferzeugern mit Wärmeübergang und chemischen Reaktionen am Beispiel des SNCR-Verfahrens und der Kohleverbrennung // Fortschritt-Berichte VDI-Verlag. 1992. Vol. 6, No. 268. 158 p.
- 7 Bolegenova S.A., Bekmukhamet A., Maximov V. et al. Numerical experimenting of combustion in the real boiler of CHP // Intern. J. of Mechanics. 2013. Vol. 7. P. 343–352.
- 8 Bekmukhamet A., Bolegenova S.A., Beketayeva M.T. et al. Numerical modeling of turbulence characteristics of burning process of the solid fuel in BKZ-420-140-7c combustion chamber // Int. J. of Mechanics. 2014. Vol. 8. P. 112–122.
- 9 Gorokhovski M., Chtab-Desportes A., Voloshina I. et al. Stochastic simulation of the spray formation assisted by a high pressure // 6-th Intern. Symposium on Multiphase Flow, Heat Mass Transfer and Energy Conversion. Book Series: AIP Conference Proceedings. 2010. Vol. 1207. P. 66–73.
- 10 Vockrodt S., Leithner R., Schiller A., et al. Firing technique measures for increased efficiency and minimization of toxic emissions in Kasakh coal firing // 19th German Conf. on Flames, Germany, 1999. Vol. 1492. – P. 93-97.
- 11 De Marco A., Lockwood F. A new flux model for the calculation of radiation furnaces // Italian Flame Days. Sanremo. 1975. P.1–13.
- 12 Askarova A., Karpenko E., Messerle V. et al. Plasma enhancement of combustion of solid fuels // J. of High Energy Chemistry. 2006. Vol. 40, Issue 2. P. 111–118.

### References

- 1 A. Askarova, S. Bolegenova, V. Maximov, M. Beketayeva, P. Safarik, J. of Thermal Science, 24(3), 275–282, (2015).
- 2 A.S. Askarova, E.I. Karpenko, Y.I. Lavrishcheva, V.E. Messerle et al., IEEE Transactions on Plasma Sci, 35(6), 1607-1616, (2007).
- 3 F. Lockwood, N. Shah, ASME–Paper. Salt Lake City, 2–7, (1976).
- 4 A.S. Askarova, M.A. Buchmann, 18th Dutch-German Conf. on Flames, Germany, 1313, 241–244, (1997).
- 5 R. Leithner, Transactions of the Society for Mining, Metallurgy and Exploration, 18, 135-145, (2005).
- 6 H. Müller, Fortschritt-Berichte VDI-Verlag, 6(268), 158, (1992).
- 7 S.A. Bolegenova, A. Bekmukhamet, V. Maximov et al., Intern. J. of Mechanics, 7, 343–352, (2013).
- 8 A. Bekmukhamet, S.A. Bolegenova, M.T. Beketayeva et al., Int. J. of Mechanics, 8, 112–122, (2014).
- 9 M. Gorokhovski, A. Chtab-Desportes, I. Voloshina et al., 6-th Intern. Symposium on Multiphase Flow, Heat Mass Transfer and Energy Conversion. Book Series: AIP Conference Proceedings, 1207, 66–73, (2010).
- 10 S. Vockrodt, R. Leithner, A. Schiller, et al., 19th German Conf. on Flames, Germany, 1492, 93-97, (1999).
- 11 A. De Marco, F. Lockwood, Italian Flame Days. Sanremo, 1–13, (1975).
- 12 A. Askarova, E. Karpenko, V. Messerle et al., J. of High Energy Chemistry, 40(2), 111–118, (2006).

2-бөлім  
**КОНДЕНСИРЛЕНГЕН КҮЙ ФИЗИКАСЫ ЖӘНЕ  
МАТЕРИАЛТАНУ ПРОБЛЕМАЛАРЫ**

---

Раздел 2  
**ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ  
И ПРОБЛЕМЫ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ**

---

Section 2  
**CONDENSED MATTER PHYSICS AND  
MATERIALS SCIENCE PROBLEMS**

Шинбаева А.К.,  
Дробышев А.С., Рамос М.,  
Соколов Д.Ю.

**Коэффициенты преломления,  
плотность и поляризуемость  
криовакуумных конденсатов  
метана**

Предлагается обсуждение экспериментальной установки, методики измерения и предварительные результаты исследования зависимости свойств криовакуумных конденсатов метана и от условий их конденсации. Основные параметры экспериментального комплекса характеризуются следующими показателями: температура поверхности конденсации в интервале от  $T=12$  К до  $T=200$  К; давление в вакуумной камере от  $10^{-8}$  Торр до 1000 Торр; толщина криоконденсированных пленок от 0,5 мкм до 100 мкм. Измерения коэффициентов преломления, толщины и плотности криоконденсатов осуществлялись с помощью двухлучевого лазерного интерферометра на длине волны излучения 630 нм. ИК-спектры полученных образцов измерялись с помощью модернизированного спектрометра ИКС-29 в интервале частот от  $400\text{ см}^{-1}$  до  $4200\text{ см}^{-1}$ .

Полученные данные по зависимости коэффициентов преломления метана от температуры конденсации позволяют сделать вывод о том, что в окрестностях  $\alpha - \beta$ -перехода при  $T = 20,4$  К данная зависимость испытывает скачкообразный разрыв.

**Ключевые слова:** плотность, коэффициенты преломления, метан.

Shinbayeva A.K.,  
Drobyshev A.S., Ramos M.,  
Sokolov D.Yu.

**Refraction of coefficient, density  
and polarizability cryovacuum  
condensate of methane**

It is proposed to discuss the experimental setup, measurements of methods and preliminary results of the research dependence of the properties of condensates cryovacuum methane and conditions of condensation. The main parameters of the experimental complex characterized by the following parameters: temperature of the condensation surface in the range of  $T = 12$  K and  $T = 200$  K; the pressure in the vacuum chamber of  $10^{-8}$  Torr to 1000 Torr; film thickness of cryocondensate from 0.5 microns to 100 microns. Measurements of refractive coefficient, the thickness and density cryocondensates carried out using a two-beam laser interferometer at a wavelength of 630 nm. IR spectrums of these samples were measured by X-upgraded spectrometer 29 in the frequency range  $400\text{ cm}^{-1}$  to  $4200\text{ cm}^{-1}$ .

The data obtained on the dependence of the refractive coefficients of the methane condensing temperature leads to the conclusion that in the vicinity of  $\alpha - \beta$ -transition at  $T = 20.4$  K this dependency undergoes abrupt discontinuity.

**Key words:** density, refractive indices, methane.

Шинбаева А.К.,  
Дробышев А.С., Рамос М.,  
Соколов Д.Ю.

**Криовакуумдық метан  
кондесаттарының сыну  
көрсеткіштері, тығыздығы  
және оның поляризациялануы**

Эксперименттік қондырғының, өлшеу әдістемесінің және криовакуумды метан кондесаттарының қасиеттерінің олардың конденсациялау жағдайына тәуелділігін зерттеудің алдын ала нәтижелері ұсынылады. Эксперименттік кешеннің негізгі параметрлері келесі көрсеткіштермен сипатталады: бетті конденсациялау температурасы  $T=12$  К-нен  $T=200$  К интервалында; вакуумды камерадағы қысым  $10^{-8}$  Торр-дан 1000 Торр-ге дейін; криоконденсацияланған үлгілердің қалыңдығы 0,5мкм-ден 100 мкм аралығында. Сыну коэффициентін криоконденсаттардың қалыңдығын және тығыздығын өлшеулер 630 нм сәулелену толқын ұзындығында екісәулелі лазерлік интерферометрдің көмегімен жүзеге асырылған.

Алынған үлгілердің ИК-спектрлері  $\text{см}^{-1}$  мен  $4200\text{ см}^{-1}$  аралығындағы жиіліктер интервалында жетілдірілген ИКС-29 спектрометрінің көмегімен өлшенді. Метанның сыну коэффициентінің конденсация температурасына тәуелділігі  $T=20,4$  К температурада  $\alpha - \beta$ -ауысу маңайында бұл тәуелділікте секірмелі үзіліс болатындығы туралы қорытынды жасауға мүмкіндік береді.

**Түйін сөздер:** тығыздық, сыну көрсеткіштері, метан.

## КОЭФФИЦИЕНТЫ ПРЕЛОМЛЕНИЯ, ПЛОТНОСТЬ И ПОЛЯРИЗУЕМОСТЬ КРИО ВАКУУМНЫХ КОНДЕНСАТОВ МЕТАНА

### Введение

Особенности свойств криовакуумных конденсатов метана – структурные, оптические, теплофизические, механические, во многом обусловлены спин-ядерными релаксационными процессами и их влиянием на вращательную и трансляционную подсистемы кристаллической решетки метана. Существует большое число работ, посвященных теоретическим разработкам и экспериментальным исследованиям этого вещества, и которые учитывают квантовую природу наблюдаемых эффектов [1-5]. Экспериментальное изучение этих процессов проводилось как напрямую, с использованием структурных методов [6, 7] и метода ядерно-магнитного резонанса [8-10], так и опосредовано, исследуя влияние конверсионных процессов на макроскопические характеристики твердого метана. Наиболее отчетливо это сказывается на колебательных спектрах метана в диапазоне трансляционных и либрационных колебаний [11, 12], а также на теплофизических свойствах метана, таких как теплоемкость [13, 14], теплопроводность [15], плотность [16-18].

В настоящей статье представлены результаты исследования влияния температуры криоконденсации метана на величину коэффициентов преломления, плотности и поляризуемости образующихся тонких пленок. В отличие от достаточно большого числа исследований этих параметров для равновесных образцов твердого метана [11, 21-23], нами предлагаются к рассмотрению результаты, полученные непосредственно в ходе криоконденсации образцов, находящихся в связи с этим в существенно неравновесном состоянии.

Измерения проведены в интервале температур от 14 К до 32 К, который включает в себя температуру  $\alpha$ - $\beta$  перехода при  $T=20,4$  К. Основная идея проведения этих исследований заключалась в следующем. Переход из ориентационно разупорядоченной  $\alpha$ -фазы в частично упорядоченную  $\beta$ -фазу и обратно меняет характер взаимодействия излучения с молекулами метана в части изменения вклада вращательной подсистемы в этот процесс [19, 20]. Это должно отразиться на величине коэффициента преломления, а его зависимость от температуры должна

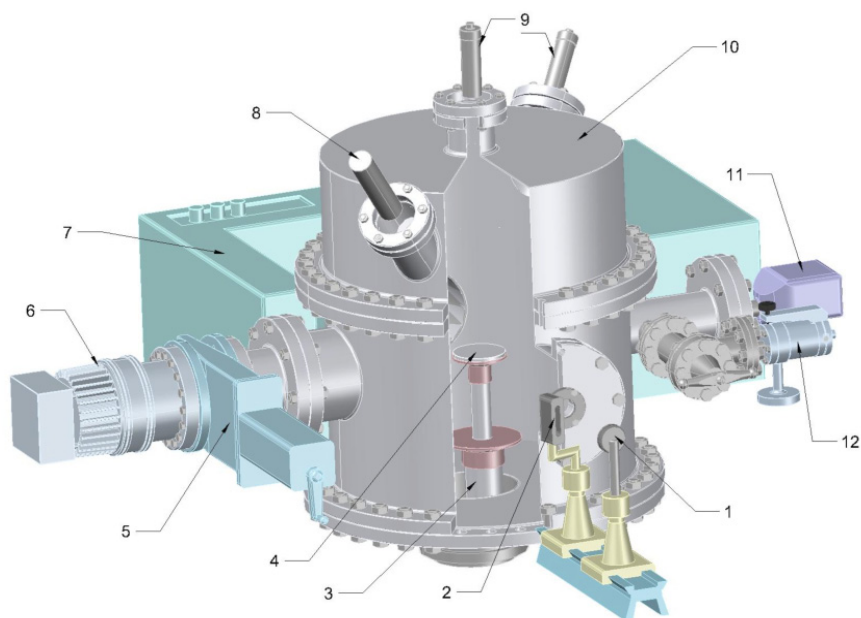
также претерпевать разрыв в окрестностях температуры превращения. Кроме того, мы также держим во внимании тот факт, что такое важное явление, как спин-ядерная конверсия, механизмы внутри-и межмолекулярного обмена в твердой фазе метана также остаются еще до конца непонятыми [19, 20], таким образом исследования оптических и теплофизических свойств твердого метана в неравновесных состояниях могут способствовать этому пониманию.

### Эксперимент и методика измерений

В данной работе мы использовали газообразный метан производства компании ИНСАН TECHNOGAZ с чистотой 99,99%. Указанные исследования проводились на установке, ранее нами достаточно подробно описанной. Однако в последнее время был проведен ряд мероприятий по ее совершенствованию, так что представляется целесообразным кратко описать как установку, так и методику измерений (рисунок 1). Основным узлом установки является вакуумная камера диаметром и высотой 450 мм. Откачка камеры до предельного вакуума  $P=10^{-8}$  Тор осуществлялась турбомолекулярным насосом Turbo-V-301. Измерение давления проводилось с помощью преобразователя

FRG-700 с контроллером AGC-100. В центре камеры расположена подложка диаметром 60 мм, установленная на верхнем фланце микрокриогенной машины Gifford-McMahon. Максимально достижимое значение температуры охлаждения подложки составляло  $T=12$  К. Измерение температуры конденсации осуществлялись кремниевым датчиком TS 670-1.4 с использованием термоконтроллера M335/20. Напуск газа осуществлялся с помощью натекателя из калиброванного объема (на рисунке не показан), что позволяло определить массу газа, конденсированного на подложку. Измерения скорости роста и толщины пленки проводилось двухлучевым лазерным интерферометром (длина волны 630 нм) с использованием фотоэлектронного умножителя P25a-SS-0-100. Колебательные спектры образовавшейся пленки измерялись с помощью ИК-спектрометра ИКС-29 в интервале частот  $400\text{ см}^{-1} - 4200\text{ см}^{-1}$ .

Порядок проведения экспериментов был следующим. Вакуумная камера откачивалась до давления  $P=10^{-8}$  Тор после чего включалась микрокриогенная машина и подложка охлаждалась до температуры конденсации  $T_c=14$  К. Далее камера перекрывалась и с помощью системы натекания в вакуумную камеру осуществлялся напуск метана.

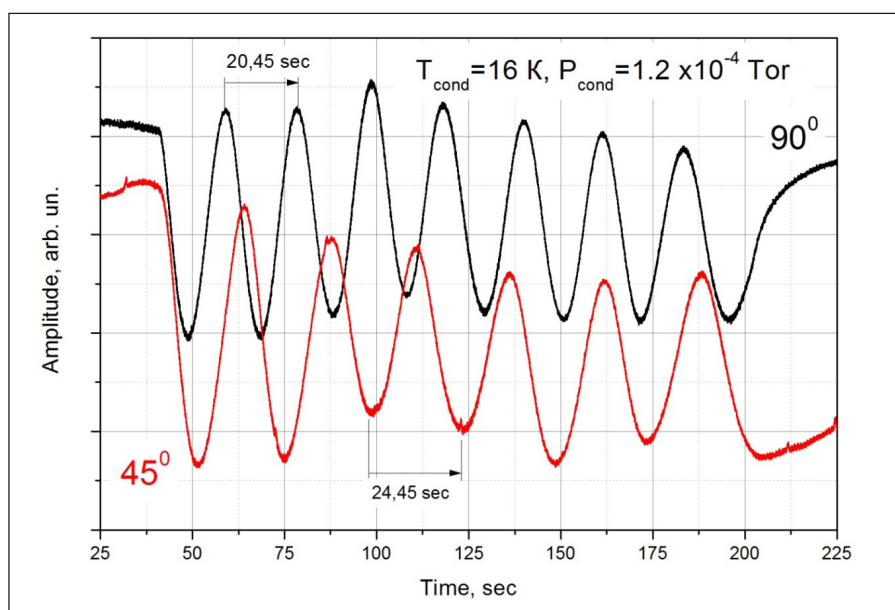


**Рисунок 1** – Схема экспериментальной установки. 1 – optical channel, 2 – light source, 3 – Gifford-McMahon refrigerator, 4 – substrate, 5 – vacuum gate valve CFF-100, 6 – vacuum pump Turbo-V-301, 7 – IR-spectrometer, 8 – photo multiplier, 9 – laser interferometer, 10 – vacuum chamber, 11 – pressure detector FRG-700, 12 – supply system

Давление в камере поднималось до давления конденсации около  $P_c = 10^{-4}$  Тор, в результате чего на подложке образовывалась пленка криоконденсата метана, скорость роста и толщина которой контролировалась двухлучевым лазерным интерферометром. На основании полученных интерферограмм (рисунок 2) с помощью известных соотношений рассчитывались коэффициенты преломления образцов и объемная скорость роста пленки. Зная массу напущенного в камеру газа, площадь подложки, толщину и коэффициент преломления пленки можно опреде-

лить плотность образцов, конденсированных на подложке при различных температурах.

На рисунке 2 для примера приведены интерферограммы роста пленки метана при температуре подложки  $T=16$  К и давлении газовой фазы  $P=1,2 \cdot 10^{-4}$  Тор. Верхняя интерферограмма получена при нормальном угле падения  $\beta=0^\circ$ , а нижняя интерферограмма получена для угла падения  $\alpha=45^\circ$ . Как видно из сравнения интерферограмм, периоды их колебаний различны, что обусловлено отличием в оптических длинах пути лазерного излучения.



**Рисунок 2** – Интерферограммы роста тонких пленок криоконденсата метана. Температура конденсации  $T=14$  К; давлении газовой фазы  $P=1,2 \cdot 10^{-4}$  Тор.  $\alpha=45^\circ$ ,  $\Delta\tau=24,4$  sec;  $\beta=0^\circ$ ,  $\Delta\tau=20,4$  sec

Таким образом, объектом исследования в данной работе явились пленки криовакуумных конденсатов метана толщиной  $d=1,5-2,0$  мкм, конденсированные на металлической подложке в интервале температур от  $T=14$  К до  $T=30$  К и давлении конденсации  $P=10^{-4}$  Тор.

### Результаты и обсуждения

Проведенные ранее и проводимые в настоящее время исследования, касающиеся теплофизических и оптических свойств твердого метана, можно разделить на два направления, отличающиеся путем приготовления образцов. В первом случае исследуемые объекты образовывались из жидкой фазы, а во втором случае рост пленок

осуществлялся путем криоконденсации из газовой фазы на охлажденной подложке. При этом в обоих случаях возможно как изучение равновесных, предварительно отожженных образцов, так и исследование собственно влияния условий образования твердого метана (температуры, давления и скорости конденсации) на исследуемые характеристики. В данной работе объектом исследований являются тонкие пленки криовакуумных конденсатов метана, образующиеся на металлической подложке в интервале температур 14-35 К. Полученные результаты сравниваются со значениями коэффициентов преломления и плотности твердого метана как равновесных отожженных образцов, так и тонких пленок, конденсированных по схожей с нашей методикой.

### Коэффициенты преломления криоконденсатов метана

В данном разделе мы обсуждаем результаты измерения коэффициентов преломления образцов метана (рисунок 3). Представлены как наши данные, так и данные других авторов. В частности, в ряде работ приводятся фрагментарно значения коэффициентов преломления твердого метана при фиксированных температурах, которые использованы нами для сравнения с результатами наших исследований. Так, в [17] приведены результаты измерения коэффициента преломления метана при температуре  $T=30$  К и равновесном давлении. Его величина составила  $n_r = 1,333$ . Близкие этому значению получены в [21] также для температуры  $T=30$  К ( $n_r = 1,329$ ). При более низких температурах конденсации данные по значениям  $n_r$  в видимой области спектра весьма ограничены. В нашем распоряжении имеется значение  $n_r = 1,323$  [22] для температуры  $T=20$  К, полученное аппроксимацией от высокотемпературных значений, а также, на наш взгляд несколько завышенное, значение  $n_r = 1,350$  [23], полученное также при  $T=20$  К.

В последнее время активизировались лабораторные исследования криоконденсированных газов, в том числе и метана, проводимые в астрофизических интересах. Свидетельством этому может служить работа [24], представляющая собой библиографический обзор данных, а также новые исследования оптических свойств криоконденсатов ряда газов, включая метан. В этих исследованиях акцент делается на изучение зависимости свойств криоконденсированных слоев метана от температуры конденсации. Наиболее близки нам по постановке вопроса, условиям и методике измерений являются результаты, приведенные в [25-27]. В этих исследованиях справедливо учитывается важность одновременного измерения коэффициента преломления и плотности криоконденсатов в ходе именно одного и того же эксперимента, так как значения обоих этих параметров зависят от условий криосождения.

На рисунке 3 представлены результаты наших измерений зависимости коэффициентов преломления метана от температуры криоконденсации в сравнении с приведенными выше данными других авторов. Основными источниками погрешности для полученных нами значений  $n_r$  являются погрешность измерения периода интерференции (0,25%) и случайная погрешность (0,3%). Таким образом, суммарная

погрешность измеренных нами значений коэффициентов преломления составляет величину не более 0,6%.

Как видно из приведенных на рисунке 3 результатов, совокупность полученных нами данных имеет ярко выраженный разрыв в окрестностях температуры фазового перехода  $T=20,4$  К. На наш взгляд это связано с тем, что каждая из этих совокупностей данных относится к различным фазовым состояниям тонкой пленки метана. Данные в интервале температур 16-19 К относятся к частично упорядоченной  $\beta$ -фазе метана, в то время как интервал температур 20,4-30 К соответствует  $\alpha$ -состоянию со свободно вращающимися молекулами метана в узлах кристаллической решетки. Таким образом можно сделать вывод о том, что сопутствующее  $\alpha$ - $\beta$ -переходу ориентационное упорядочивание трех четвертей молекул метана [2] приводит к существенному скачкообразному уменьшению коэффициента преломления образцов в окрестности температуры фазового перехода.

Из рисунка видно, что приведенные литературные данные значений  $n_r$  [17, 21, 22, 25-27] находятся в удовлетворительном согласии с нашими данными, за исключением данных, приведенных в [23]. При этом необходимо отметить следующее. Ранее в [17] анализировались причины отклонения значений коэффициента преломления метана, полученных в [23]. Предполагалось, что причиной такого отклонения является тот факт, что данные в [23] получены для тонких пленок криоконденсатов метана, в отличие от данных для монолитных образцов. На наш взгляд, такое объяснение является не вполне корректным, т.к. данные, приведенные на рисунке 3, также получены для тонких пленок криовакуумных конденсатов метана, и они вполне согласуются между собой.

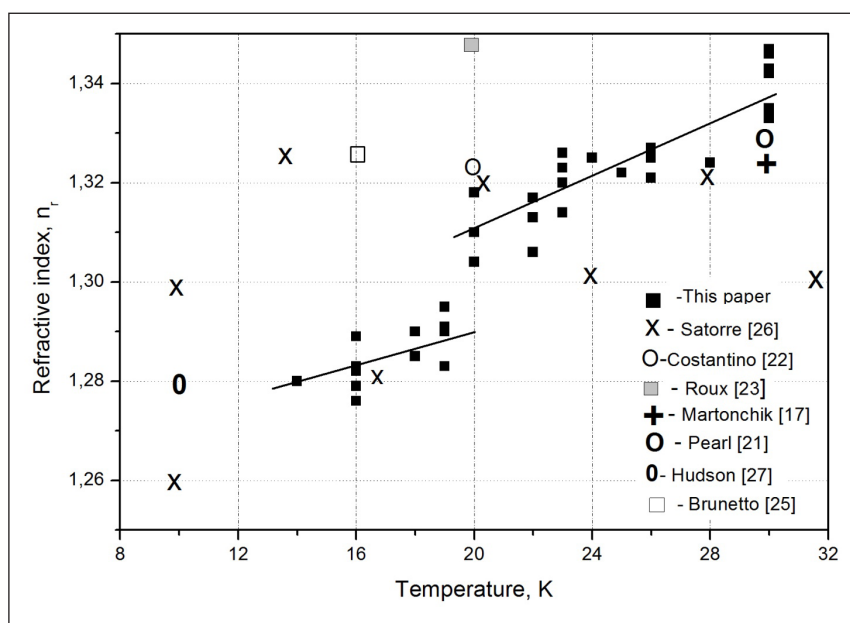
Ниже в таблице приведены осредненные значения измеренных нами коэффициентов преломления тонких пленок метана максимальной толщины  $d=1,5$  мкм для различных температур конденсации. Давление конденсации  $P=10^{-4}$  Тор.

К приведенной таблице необходимо сделать два комментария. Во-первых, указанная толщина  $d=1,5$  мкм является максимальным значением, достигаемыми в процессе роста пленки. Второй комментарий касается температуры конденсации  $T=20$  К. В связи с тем, что температура поверхности конденсации поддерживалась с точностью  $\Delta T=\pm 0,5$  К, то при  $T=(20\pm 0,5)$  К процесс конденсации должен был осуществляться



попеременно в  $\alpha$ - и  $\beta$ -фазах. Однако во всех экспериментах полученные значения коэффициентов преломления явно «тяготеют» к высокотемпературной  $\alpha$ - фазе. Возможно, это связано

с различием в механизмах релаксации. В этой связи нами проведены специальные оптические исследования, результаты которых мы изложим в следующей статье.



**Рисунок 3** – Зависимость коэффициента преломления криовакуумных конденсатов метана от температуры конденсации. Давление конденсации  $P=10^{-4}$  Тор

**Таблица** – Коэффициенты преломления тонких пленок метана, криоконденсированных при различных температурах. Давление конденсации  $P=10^{-4}$  Тор. Толщин образцов  $d=1,5$  мкм

Температура конденсации	T=16 K	T=19 K	T=20 K	T=23 K	T=30 K
Коэффициент преломления	$1,282 \pm 0,007$	$1,289 \pm 0,006$	$1,311 \pm 0,007$	$1,320 \pm 0,006$	$1,340 \pm 0,007$

Что касается общей для обеих  $\alpha$ - и  $\beta$ -фаз метана тенденции уменьшения значений коэффициента преломления при понижении температуры конденсации, то данный факт является также характерным и для других газовых криоконденсатов. Так, величина  $n_r$  на длине волны 632 нм для криоконденсатов двуокиси углерода [28] уменьшается от  $n_r=1,41$  для температуры конденсации  $T=77$  К до  $n_r=1,28$  для  $T=20$  К. При этих же условиях коэффициент преломления аммиака [29] изменялся от  $n_r=1,41$  до  $n_r=1,37$ . При этом в данных исследованиях изменений в коэффициенте преломления криоконденсатов воды с уменьшением температуры конденсации от 80 К до 20 К авторы не обнаружили. Ранее нами также были про-

ведены измерения коэффициентов преломления и плотности криовакуумных конденсатов двуокиси углерода и воды [30-31], результаты которых находятся в хорошем согласии с данными [28, 29].

### Плотность криоконденсатов метана

Одновременно с измерением коэффициентов преломления криопленок метана были определены значения их плотности в зависимости от температуры криоосаждения. Эти данные приведены на рисунке 4. Измерения проведены в интервале температур от  $T=14$  К до  $T=30$  К и давлении газовой фазы  $P=10^{-4}$  Тор. Величина давления выбрана из тех соображений, чтобы

обеспечить необходимое пересыщение газовой фазы при температурах конденсации вблизи линии равновесия.

Погрешность измерения плотности  $\rho$  не превышает 4-5 % и определяется, в основном, погрешностью измерения остаточного давления газообразного метана в калибровочном объеме, а также случайной погрешностью.

Сравнение наших данных с результатами других авторов позволяет сделать следующие выводы. Во-первых, наблюдается четкое различие в значениях плотности равновесных образцов [6, 17, 18] и полученных непосредственно в ходе криоконденсации [данная статья, 26]. В частности в [6] рентгеновским методом измерены параметры решетки твердого метана в

окрестностях температуры  $\alpha$ - $\beta$ -перехода ( $T=20,4$  К). При этом образцы конденсировались из газовой фазы на подложку при температуре  $T=5$  К и далее отжигались в течении 2 часов при температуре 35-40 К. Т.е. измерялись параметры решетки бездефектных образцов поликристаллического метана при постепенном понижении температуры. Как видно из приведенных на рисунке данных [6], в окрестностях температуры фазового перехода  $T=24$  К отчетливо наблюдается скачкообразное увеличение плотности метана. Общее монотонное и, вместе с тем, слабое увеличение плотности метана связано с зависимостью параметра кубической решетки метана от температуры, что сказывается на значениях плотности образцов метана.

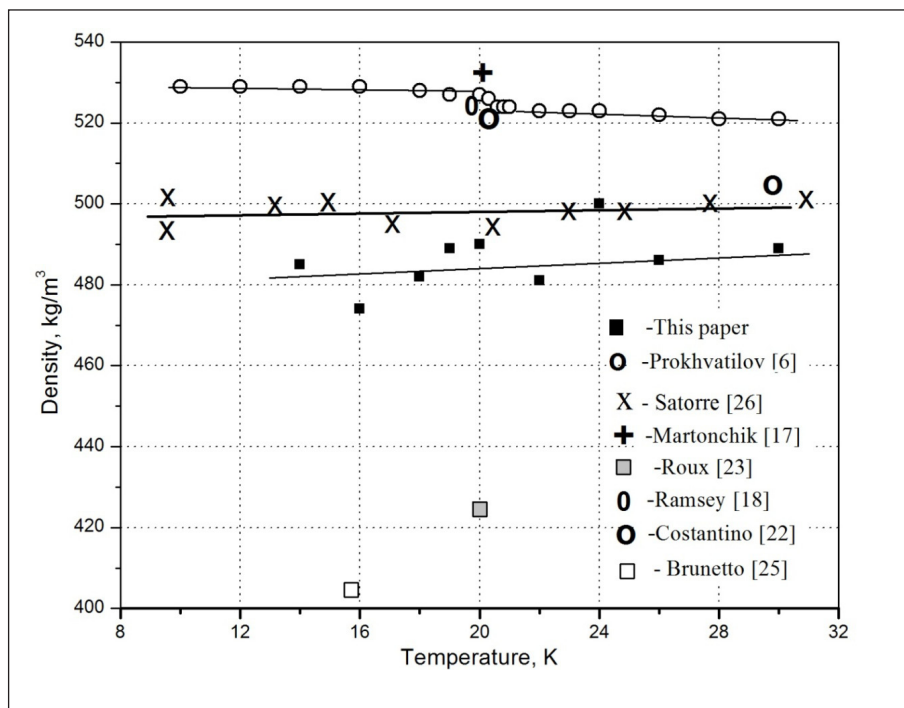


Рисунок 4 – Зависимость плотности твердого метана от температуры конденсации. Давление конденсации  $P=10^{-4}$  Тор

Анализ результатов наших измерений плотности метана приводит к следующим выводам. Как видно, плотность конденсированных пленок метана остается практически постоянной с понижением температуры конденсации. Слабое уменьшение значений плотности незначительно выходит из доверительного интервала, обусловленного погрешностью измерений. Видно, что наши результаты находятся в прекрасном согласии с данными [26], которые были получе-

ны по аналогичной с нами методике. Очевидное отклонение представляют, на наш взгляд, явно заниженные значения плотности, полученные в работах [23] и [25]. Для данных, полученных в [23], существенное отклонение полученных результатов от других авторов является характерным, в том числе и для значений коэффициента преломления (рисунок 3). Т.е. в данном случае речь может идти о не выявленной систематической погрешности проведенных в [23] измере-

ний. Что касается значения плотности, предлагаемого в [25], то оно рассчитано с использованием уравнения Лорентца-Лоренца  $L\rho=(n^2-1)/(n^2+2)$ . При этом используемое для расчетов значение коэффициента Лорентца-Лоренца  $L=0,505 \text{ cm}^3\text{g}^{-1}$ , было измерено в [23], что может быть причиной наблюдаемого отклонения.

Незначительное уменьшение плотности метана с понижением температуры конденсации может быть связано с увеличением пористости образцов твердого метана с понижением температуры конденсации. Это согласуется с данными для других криоконденсированных газов [28, 29], для которых, как правило, понижение температуры конденсации также приводит к уменьшению плотности криоосадков. Так, для двуокиси углерода изменение температуры конденсации от 77 К до 20 К приводит к падению плотности криоконденсата  $\text{CO}_2$  от  $1670 \text{ kg/m}^3$  (при 77 К) до  $1080 \text{ kg/m}^3$  (при 20 К). Соответственно плотность криоконденсата аммиака изменялась от  $870 \text{ kg/m}^3$  до  $760 \text{ kg/m}^3$ . Очевидной причиной такого поведения плотности, по мнению авторов, также является увеличение пористости образцов при понижении температуры конденсации. Тот факт, что по сравнению с указанными газами плотность метана изменяется весьма незначительно, как в наших исследованиях, так и в [26], можно объяснить достаточно узким интервалом температур конденсации образцов (30 К-14 К).

Что касается поведения плотности в окрестностях температуры фазового перехода, то необходимо отметить, что достаточно высокая погрешность наших измерений плотности метана (около 4-5 %) не позволила идентифицировать фазовый переход из  $\alpha$ - в  $\beta$ -фазу по скачку плотности, как это продемонстрировано в [6].

## Выводы

Подводя итоги проведенных нами исследований можно сделать ряд выводов и предположений. В той или иной степени они связаны с существованием фазового перехода в твердом метане при температуре  $T=20,4 \text{ К}$ . Как мы уже отмечали [2-5], при этой температуре реализуется переход от ориентационно разупорядоченной высокотемпературной фазы метана ( $\alpha$ -фаза) к частично упорядоченной фазе ( $\beta$ -фаза). Скачкообразное уменьшение числа степеней свободы деформационно-вращательной подсистемы кристаллической решетки метана приводит к соответствующему изменению ряда оптических и теплофизических характеристик исследуемых

образцов [11-17]. Мы полагали, что этот эффект должен наблюдаться и для значений коэффициента преломления, т.к. его величина непосредственно связана с характером взаимодействия излучения с молекулами, в нашем случае, метана. Как видно из рисунка 3, в окрестностях температуры  $T=20 \text{ К}$  полученная нами зависимость коэффициента преломления от температуры конденсации претерпевает скачкообразное уменьшение с понижением температуры, что подтверждает наше предположение. Приведенные на рисунке данные других авторов хорошо согласуются с нашими результатами, особенно если взять осредненную по двум значениям величину коэффициента преломления при  $T=10 \text{ К}$ , полученную в работе [26].

Что касается плотности криоконденсатов метана, то измеренные нами значения находятся в хорошем согласии с данными авторов, работающих по схожей с нами методике [24, 26]. Отсутствие особенностей в температурной зависимости плотности в окрестности  $T=20 \text{ К}$  очевидно объясняется недостаточной точностью проводимых нами измерений, т.к. по данным [6] общее изменение объема (и, соответственно, плотности) метана в интервале температур от 10 К до 90 К составляет чуть более 6%. Т.е. измеренные нами значения плотности с погрешностью около 4-5% не чувствуют собственно изменения плотности при фазовом переходе. Кроме того, увеличение пористости образцов с понижением температуры конденсации также может компенсировать наблюдаемый в [6] эффект.

Наличие данных по коэффициентам преломления и плотности метана, полученных в ходе одного и того же эксперимента, позволяет определить величину поляризации молекул метана, находящихся в твердой фазе. Эти расчеты были нами проведены с использованием уравнения Лорентца-Лоренца по аналогии с расчетами поляризуемости двуокиси углерода, проведенными в работе [28]:

$$\alpha = \{(n^2-1)/(n^2+2)\} 3M/4\pi \rho N_A,$$

здесь:  $\alpha$  – объемная поляризуемость,  $\text{m}^3$ ;  $M$  – молярная масса метана,  $M=16,04 \text{ kg/кмоль}$ ;  $N_A$  – число Авагадро,  $N_A=6,022 \cdot 10^{26} \text{ 1/кмоль}$ ;  $n$  – коэффициент преломления на частоте излучения He-Ne-лазера;  $\rho$  – плотность криоконденсата метана при соответствующей коэффициенту преломления температуре.

Нами проведены расчеты поляризуемости  $\alpha$  при двух значениях температуры конденсации

–  $T=16$  К и  $T=30$ К, т.е. образцов, находящихся в двух различных состояниях вращательной подсистемы кристаллической решетки метана. Для температуры  $T=16$  К использовались измеренные нами значения плотности  $\rho=480$  кг/м<sup>3</sup> и коэффициента преломления  $n=1,282$ . Соответствующее значение поляризуемости составило величину  $\alpha_{16\text{К}}=(23,1\pm 0,5) \cdot 10^{-30}$  м<sup>3</sup>. Для температуры конденсации  $T=30$ К при соответствующих значениях плотности  $\rho=490$  кг/м<sup>3</sup> и коэффициента преломления  $n=1,340$  значение поляризуемости составило величину  $\alpha_{30\text{К}}=(26,8\pm 0,6) \cdot 10^{-30}$  м<sup>3</sup>. Таким образом относительное изменение поляризуемости в данном интервале температур составило величину  $\alpha_{16\text{К}}/\alpha_{30\text{К}}=0,86$ .

Мы полагаем, что наблюдаемое изменение поляризуемости обусловлено следующими обстоятельствами. Как мы уже отмечали [8, 19, 20], результатом фазового перехода является изменение характера движения во вращатель-

ной подсистеме решетки метана. От свободных ротаторов в области более высоких температур система переходит в состояние с восемью подрешетками, причем шесть из них состоят из ориентированных определенным образом молекул метана, в то время как в двух подрешетках молекулы свободно вращаются. Т.е. можно предположить, что эффективное значение поляризуемости при температуре конденсации ниже  $T=20$  К представляет собой суперпозицию поляризуемостей связанных и свободных молекул метана в соотношении 6/2. К сожалению, отсутствие в настоящее время информации о данных по поляризуемости полностью упорядоченной  $\gamma$ -фазы метана не позволяет сделать оценку вклада вращательной подсистемы  $\beta$ -фазы в общую поляризуемость криоконденсатов метана.

*Работа выполнена в соответствии с Грантом 3118/ГФ4 Министерства образования и науки Республики Казахстан.*

#### Литература

- 1 Clusius K. // Journal of Physical Chemistry. – 1929. – Vol. 3. – P.41.
- 2 James H.M., Keenan T.A. // Journal of Physical Chemistry. – 1959. – Vol. 31. – P.12
- 3 Colwell J.H., Gill E.K., J.A. Morrison // Journal of Physical Chemistry. – 1973. – Vol. 39. – P.653.
- 4 Kruis J.A., Popp L. and Clusius K. Über Umwandlungen in festen Hydriden und Deuteriden // Z. Elektrochem. – 1937. – Vol. 43(8). – P. 664-666.
- 5 Bartholome E., Drikos G., Eucken A. // Journal of Physical Chemistry B. – 1938. – Vol. 39. – P.371.
- 6 Prokhvatilov A., Isakina A. Lattice parameters, thermal expansion coefficients and density of vacancies in solid CH<sub>4</sub> // Fizika nizkikh temperatur. – 1983. – Vol. 9. – N 4. – P.419-429.
- 7 Baer D.R., Fraass B.A., Riehl D.H., Simmons R.O. Lattice parameters and thermal expansion of solid CD<sub>4</sub> // Journal of Physical Chemistry. – 1978. – Vol. 68. – N4. – P.1411-144.
- 8 Nijman A. J., Trappeniers N.J. A high pressure NMR study of solid methane: I. The second moment // Physica B. – 1978. – Vol. 95. – P.147-162.
- 9 Beckman P.A., Bloom M., Ozier I. Proton spin relaxation in dilute methane gas: A symmetrized theory and its experimental verification // Can. Jour. of Phys. – 1976. – Vol. 54, No16. – P.1712-1727.
- 10 Buchman S., Candela D., Vetterling W., Pound R. Spin-species conversion rate in solid CH<sub>4</sub> in the temperature range 4-23 K // Phys. Rev. B – 1982. – Vol. 26. – P.1459.
- 11 Chapados C., Cabana A. Infrared Spectra and Structures of Solid CH<sub>4</sub> and CD<sub>4</sub> in Phases I and II // Can. Jour. of Chem. – 1972. – Vol. 50. – P.3521-3533.
- 12 Miyamoto Y., Fushitani M., Ando D., Momose T. Nuclear spin conversion of methane in solid parahydrogen // J. of Chem. Phys. – 2008. – Vol. 128. – P.114502.
- 13 Bagatskii M., Mashchenko D., Dudkin V. Phase transitions in solid Kr-CH<sub>4</sub> solutions and rotational excitations in phase II // Fizika nizkikh temperatur. – 2007. – Vol.33, No 6/7. – P.728-734.
- 14 Bagatskii M.I., Manzhelii V.G., Minchina I.Ya, Mashchenko D.A., Gospodarev I.A. Rotational Excitations in Concentrated Solid Kr-CH<sub>4</sub>Solutions: Calorimetric Studies // Jour. of Low Temp. Phys. – 2003. – Vol. 130, No 5-6. – P.459-475.
- 15 Pisarska E., Stachwiak P., Jezowski A. Observation of relaxation of molecular spins in CH<sub>4</sub> and CD<sub>4</sub> crystals in thermal conductivity experiment // Fizika nizkikh temperatur. – 2007. – Vol.33, No 6/7. – P. 768-771.
- 16 Manzhelii V.G., Tolkachev A.M. Densities of Ammonia and Methane in the Solid State. // Sov. Phys. Solid State. – 1964. – Vol. 5, No 2506.
- 17 Martonchik J., Orton G. Optical constants of liquid and solid methane // Applied Optics. – 1994. – Vol. 33(36). – P.8306-8317.
- 18 Ramsey W.H. On the densities of methane, metallic ammonium, water and neon at planetary pressures // Mon. Not. Royal Astr. Soc. – 1963. – Vol. 125. – P.469-185.
- 19 Nijman A. J., Berlinsky A. J. Theory of Nuclear Spin Conversion in the  $\beta$  Phase of Solid Methane // Phys. Rev. Lett. – 1977. – Vol. 38, No 8. – P. 408.
- 20 Nijman A. J., Berlinsky A. J. Theory of nuclear spin conversion in the  $\beta$  phase of solid CH<sub>4</sub> // Can. Jour. of Phys. – 1980. – Vol. 58, No 8. – P.1049-1069.
- 21 Pearl J., Ngoh N., Ospina M., Khanna R. Optical Constants of Solid Methane and Ethane from 10,000 to 450 cm<sup>-1</sup> // J. Geo-

phys.Res. – 1991. Vol. 96, No 17. – P.477.

22 Costantino M.S., Daniels W.B. Dielectric Constant of Compressed Solid Methane at Low Temperature. // J. Chem. Phys. – 1975. Vol. 62. – P.764.

23 Roux J.A., Wood B.E., Smith A.M., Plyler R.R. Infrared Optical Properties of Thin CO, NO, CH<sub>4</sub>, HCl, N<sub>2</sub>O, O<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, Ar, and Air Cryofilms. // Arnold Engineering Development Center Tech. Rep. AEDC- TR-79-81. – 1979. Vol. NTIS accession number AD A088269.

24 Bouilloud M., Fray N., Benilan Y., Cottin H., Gazeau M.C., Jolly A. Bibliographic review and new measurements of the infrared band strengths of pure molecules at 25 K: H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub>, CO, CH<sub>4</sub>, NH<sub>3</sub>, CH<sub>3</sub>OH, HCOOH and H<sub>2</sub>CO. // Monthly notices of the Royal Astronomical Society. – 2015. Vol.451, No 2.

25 Brunetto R., Caniglia G., Baratta G. A., Palumbo M. E. Integrated near-infrared band strengths of solid CH<sub>4</sub> and its mixtures with N<sub>2</sub>. // The Astrophysical Journal. – 2008. – No. 686:1480Y1485.

26 Satorre M.A., Domingo M., Millan C., Luna R., Vilaplana R., Santonja C. Density of CH<sub>4</sub>, N<sub>2</sub> and CO<sub>2</sub> ices at different temperatures of deposition. // Planetary and Space Science. – 2008. – Vol. 56, No 1748–1752.

27 Gerakines Perry A., Hudson Reggie L. Infrared spectra and optical constants of elusive amorphous methane. // Astrophysical Journal Letters. – 2015. Vol.2, No 805. – P. 5.

28 Domingo M., Luna R., Satorre M.A., Santonja C., Millán C. Experimental Measurement of Carbon Dioxide Polarizability in the Solid State. // Journal of Low Temperature Physics. – 2015. – Vol. 181, No 1. – P.1-9.

29 Wood B. E., Roux J. A. Infrared optical properties of thin H<sub>2</sub>O, NH<sub>3</sub>, and CO<sub>2</sub> Cryofilms. // J. Opt. Soc. Am. – 1982. – Vol. 72, No 6.

30 Drobyshev A.S., Garipogly D.N. Cryocrystals CO<sub>2</sub> and N<sub>2</sub>: Growth rate, refractivity and IR reflection spectra. // Fizika nizkikh temperatur. 1996. Vol. 22(7). – P.814-818.

31 Drobyshev A.S., Atapina N.V. and at al. IR-spectrum and structure of water-vapor cryocondensates. // Fizika nizkikh temperatur. – 1993. – Vol. 19 (5). – P. 567-569.

#### References

- 1 K. Clusius, Journal of Physical Chemistry, 3, 41, (1929).
- 2 H.M. James, T.A. Keenan, Journal of Physical Chemistry, 31, 12, (1959).
- 3 J.H. Colwell, E.K. Gill, J.A. Morrison, Journal of Physical Chemistry, 39, 653, (1973).
- 4 J.A. Kruis, L. Popp and K. Clusius, Z. Elektrochem, 43(8), 664-666, (1937).
- 5 E. Bartholome, G. Drikos, A. Eucken, Journal of Physical Chemistry, B39, 371, (1938).
- 6 A. Prokhvatilov, A. Isakina, Fizika nizkikh temperatur, 9(4), 419, (1983).
- 7 D.R. Baer, B.A. Fraass, D.H. Riehl, R.O. Simmons, Journal of Physical Chemistry, 68(4), 1411, (1978).
- 8 A.J. Nijman, N.J. Trappeniers, Physica, 95B, 147, (1978).
- 9 P.A. Beckman, M. Bloom, I. Ozier, Can. Jour. of Phys., 54(16), 1712-1727, (1976).
- 10 S. Buchman, D. Candela, W. Vetterling, R. Pound, Phys. Rev., B26, 1459, (1982).
- 11 C. Chapados, A. Cabana, Can. Jour. of Chem., 50, 3521, (1970).
- 12 Y. Miyamoto, M. Fushitani, D. Ando, T. Momose, J. of Chem. Phys., 128, 114502, (2008).
- 13 M. Bagatskii, D. Mashchenko, V. Dudkin, Fizika nizkikh temperature, 33(6/7), 728-734, (2007).
- 14 M.I. Bagatskii, V.G. Manzhelii, I.Ya. Minchina, D.A. Mashchenko, I.A. Gospodarev, Jour. of Low Temp. Phys., 130(5-6), P. 459-475, (2003).
- 15 E.Pisarska, P.Stachwiak, A.Jezowski, Fizika nizkikh temperatur, 33(6/7), 768-771, (2007).
- 16 V.G. Manzheliiand, A.M. Tolkachev, Sov. Phys. Solid State, 5, 2506, (1964).
- 17 J. Martonchik, G. Orton, Applied Optics, 33(36), 8306-8317, (1994).
- 18 W.H. Ramsey, Mon. Not. Royal Astr. Soc., 125, 469-185, (1963).
- 19 A.J. Nijman, A.J. Berlinsky, Phys. Rev. Lett., 38(8), 408, (1977).
- 20 A.J. Nijman, A.J. Berlinsky, Can. Jour. of Phys., 58(8), 1049-1069, (1980).
- 21 A.J. Nijman, A.J. Berlinsky, R.Khanna, J. Geophys.Res., 96(17), 477, (1991).
- 22 M.S. Costantino, W.B., J. Chem. Phys., 62, 764, (1975).
- 23 J.A. Roux, B.E. Wood, A.M. Smith, R.R., Arnold Engineering Development Center Tech. Rep. AEDC- TR-79-81, Vol. NTIS accession number AD A088269, (1979).
- 24 M. Bouilloud, N. Fray, Y. Benilan, H. Cottin, M.C. Gazeau, A.Jolly, Monthly notices of the Royal Astronomical Society, 451(2), (2015).
- 25 R. Brunetto, G. Caniglia, G.A. Baratta, M.E. Palumbo, The Astrophysical Journal, 686:1480Y1485, (2008).
- 26 M.A. Satorre, M. Domingo, C. Millan, R. Luna, R. Vilaplana, C. Santonja, Planetary and Space Science, 56, 1748–1752, (2008).
- 27 P.A. Gerakines, R.L. Hudson, Astrophysical Journal Letters, 2(805), 5, (2015).
- 28 M. Domingo, R. Luna, M.A. Satorre, C. Santonja, C. Millán, Journal of Low Temperature Physics, 181(1), 1-9, (2015).
- 29 B.E. Wood, J.A., J. Opt. Soc. Am., 72(6), (1982).
- 30 A.S. Drobyshev, D.N. Garipogly, Fizika nizkikh temperatur, 22(7), 814-818, (1996).
- 31 A.S. Drobyshev, N.V. Atapina and at al., Fizika nizkikh temperatur, 19(5), 567-569, (1993).

Мырзабекова М.М.,  
Гусейнов Н.Р., Кудряшов В.В.,  
Немкаева Р.Р., Ильин А.М.

**Радиационная модификация  
графеновых структур и  
исследование физико-  
механических свойств  
композитов полученных  
на их основе**

При применении графена в устройствах, возможно, его облучение электронами или ионами, например, в области космической техники, которые приведут к изменениям их свойств. Кроме того, в некоторых случаях, облучение может быть использовано в качестве технологического инструмента модификации свойств графена. Таким образом, исследование возможных радиационных эффектов в этих структурах становится предметом большой важности. Представлены результаты облучения графена и трехслойного графена в сканирующем электронном микроскопе энергией 15 кэВ. Данные спектроскопии комбинационного рассеяния FLG показывают структурные изменения, вызванные воздействием электронного пучка. Спектры комбинационного рассеяния света характеризуются отчетливым появлением дополнительных пиков D и D', которые указывают на формирование определенного типа дефектов. В ходе различных экспериментов на графеновых структурах было обнаружено, что при облучении электронным пучком, в частности в СЭМ, возможно формирование мостиковых дефектов в структуре FLG. Мостиковые дефекты предотвращают скольжение между слоями графена, что открывает широкие возможности применения этих углеродных наноструктур. Кроме того, в настоящей работе приводятся результаты экспериментальных исследований физико-механических свойств композитных материалов на основе полимеров с наполнителями из нанопорошка графита.

**Ключевые слова:** графен, радиационная модификация, композитные материалы, дефекты, облучение электронами, Рамановская спектроскопия.

Myrzabekova M.M.,  
Guseinov N.R., Kudryashov V.V.,  
Nemkayeva R.R., Ilyin A.M.

**Radiation modification of  
graphene structures and study  
of physical and mechanical  
properties of composites based  
on it**

During the application of graphene in a variety of devices there is a possibility of its irradiation by electrons or ions, for example, in the area of space technology, when a certain conditions can lead to changes in its properties. Furthermore, in some cases, irradiation can be used as a technological tool of modification of graphene properties. Therefore, the investigation of possible radiation effects in these such structures becomes a subject of great importance. The results of irradiation of graphene and a three-layer graphene in a scanning electron microscope by energy of 15 keV are presented. Raman spectroscopy data of FLG show structural changes caused by exposure to the electron beam. Raman spectra are characterized by a distinct developed additional peaks D and D', which indicate the formation of a certain type of defects. In the course of various experiments on graphene structures it was found that under the irradiation by the electron beam in particular in the SEM, the formation of bridge-like defects in the structure of the few-layer graphene is possible. Bridge-like defects prevent sliding between the layers of graphene, which opens wide possibilities of the application of these carbon nanostructures. In addition in this paper we present the results of experimental studies of physical and mechanical properties of composite materials based on polymers with fillers of graphite nanopowder.

**Key words:** graphene, radiation modification, composite materials, defects, electron irradiation, Raman spectroscopy.

Мырзабекова М.М.,  
Гусейнов Н.Р., Кудряшов В.В.,  
Немкаева Р.Р., Ильин А.М.

**Графен құрылымдардың  
радиациялық түрлендіруі және  
олардың негізінде алынған  
композиттердің физико-  
механикалық қасиеттерінің  
зерттеуі**

Жабдықтарда графен қолданғанда, электрондармен немесе иондармен оның сәулеге түсуі мүмкіндігі бар, мысалы, олардың қасиеттеріне өзгерістер келтіретін ғарыштық техниканың облыстарына. Сонымен қатар, кейбір жағдайларда, сәулелендіру графен қасиеттерін түрлендіру құралы ретінде қолданылуға мүмкіндігі бар. Осылайша, бұл құрылымдарда ықтимал радиациялық әсерлерді зерттеу үлкен маңызды зат болып табылады. Сканирлеуші электрондық микроскопта 15 кэВ энергиямен сәулелендірілген графен және үш қабатты графен нәтижелері көрсетілген. Раман спектроскопиясынан алынған деректер FLG-да электрондық шоктың әсерімен шақырған құрылымдық өзгерістер барын көрсетеді. Раман спектрлері D және D' қосымша шыңдардың айқын пайда болумен бейнеленіп жатыр. Олар нақтылы түрдегі ақаулар құрастырылғанын көрсетіп жатыр. Әр түрлі тәжірибелер барысында графен құрылымдарында электрондық шок сәулесіне түсірілгенде, сонымен қатар СЭМ-де, FLG құрамында көпірлі ақаулардың құрастыру мүмкіндігі көрсетілген еді. Көпірлі ақаулар графен қабаттарының арасында сырғанаудан сақтайды. Бұл көміртекті наноқұрылымдардың қолдануға кең мүмкіндіктерді ашып жатыр. Сонымен қатар, осы жұмыста графиттың наноұнтағы толтырғыштар ретінде полимерлерге енгізіліп, композит материалдардың физико-механикалық қасиеттері эксперименталды зерттеулердің нәтижелерінде келтірілген.

**Түйін сөздер:** графен, радиациялық түрлендіру, композитті материалдар, ақаулар, электрондармен сәулелендіру, Раман

**РАДИАЦИОННАЯ  
МОДИФИКАЦИЯ  
ГРАФЕНОВЫХ СТРУКТУР  
И ИССЛЕДОВАНИЕ ФИ-  
ЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИХ  
СВОЙСТВ  
КОМПОЗИТОВ  
ПОЛУЧЕННЫХ  
НА ИХ ОСНОВЕ****Введение**

Многие трудности, связанные с использованием графена исходят из его довольно закрытой электронной структуры. Это приводит к слабому взаимодействию между поверхностью графена и атомами многих потенциально выгодных матричных материалов. Гидрофобность и химическая инертность графена обусловлены сильными ковалентными  $sp^2$  С-С связями по сравнению со слабым взаимодействием поверхностей этих наноструктур с атомами других веществ. Кроме того, слабые Ван-дер-Ваальсовы связи являются причиной легкого скольжения графеновых слоев между собой [1]. Все эти недостатки сокращают применимость этого материала as-grown. Для преодоления этих недостатков предлагается функционализировать получаемый графен такими методами, как радиационная модификация.

Так называемые “мостиковые” радиационные дефекты в малослойном графене могут существенно улучшить способность к связыванию поверхности графена с атомами многих веществ, представляющих интерес, в частности, с металлическими материалами за счет производства дополнительных прочных ковалентных связей.

Графеновые структуры рассматриваются как перспективные материалы для широкого круга будущих технологий, связанных с производством новых композиционных материалов, как хранителей и носителей водорода для водородной энергетики, электронных устройств, электрических источников, в частности, литий-ионных источников питания [2-4]. В некоторых практических применениях устройств на основе графеновых структур могут быть подвергнуты облучению быстрыми частицами (например, в космическом пространстве или ядерных технологиях), которые приведут к некоторым изменениям их свойств. К тому же, контроль дефектов и их расположение в упорядоченных структурах позволяет производить подготовку новых на основе графена материалов с новыми свойствами. Поэтому принципиально важно исследовать дефекты и установить точный характер нарушения. Таким образом, изучение свойств графеновых структур после облучения

является перспективной и необходимой областью исследования.

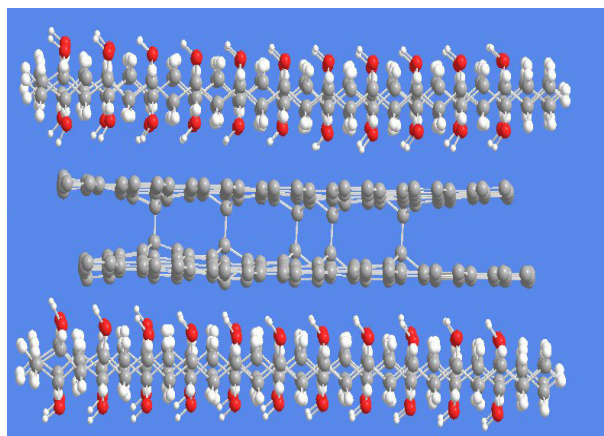
### Компьютерное моделирование и расчеты

Очень часто разработка и изучение новых наноструктур и наноматериалов затруднены размерами объектов [5]. В связи с этим, важную роль играет компьютерное моделирование исследуемых объектов. В таких ситуациях только компьютерная модель наноструктуры и расчеты позволяют получить более или менее достоверный широкий набор характеристик для различных внешних условий и типов воздействий, например механических напряжений, деформации, радиационного воздействия, химических взаимодействий на уровне функционализации наноструктуры.

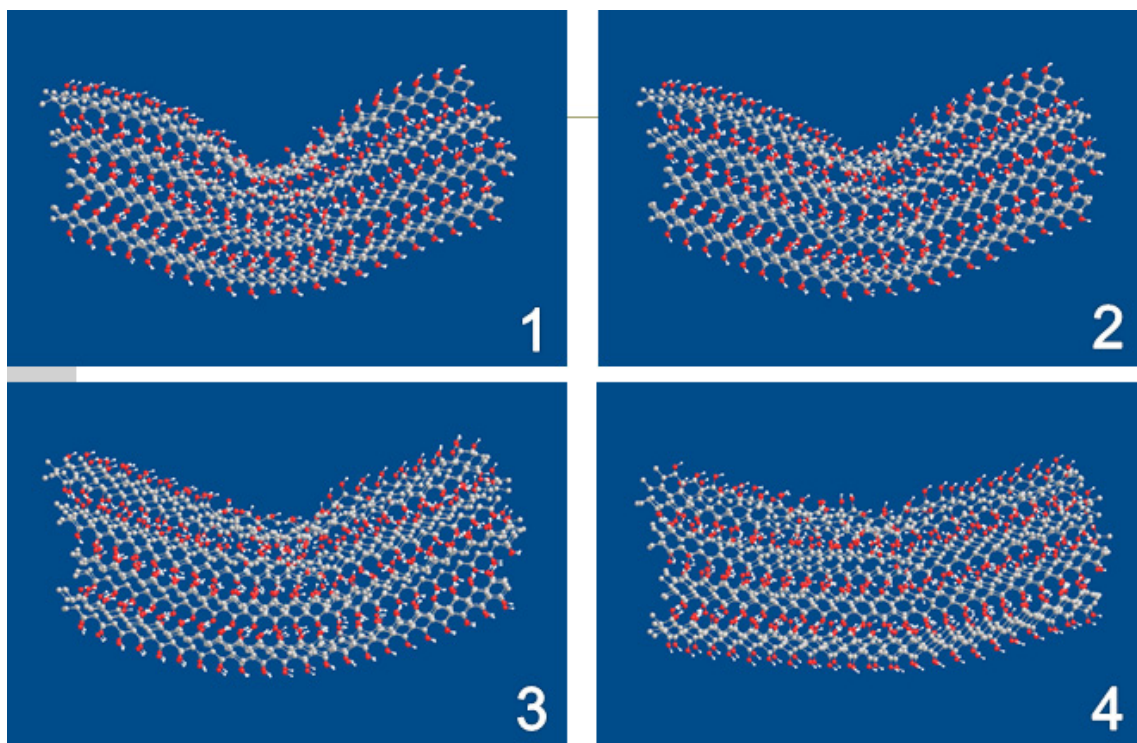
Компьютерное моделирование и расчеты, представленные в работе, были выполнены с помощью метода молекулярной динамики. Все атомные конфигурации дефектов были получены с использованием процедуры оптимизации энергии.

На рисунке 1 можно увидеть сложную конфигурацию дефектов, которые были получены

на FLG (few-layer graphene). Этот тип дефекта называется мостиковый дефект [6]. Существенной особенностью дефекта является то, что два графеновых листа соединены прочной ковалентной связью за счет мостикового дефекта.



**Рисунок 1** – Компьютерная модель композита «полимер -FLG с мостиковыми дефектами» белые шары – атомы водорода, красные шары – атомы кислорода, серые шары – атомы углерода



**Рисунок 2** – Этапы релаксации деформации модели полимера ПВС



На различных компьютерных моделях была приложена нагрузка и наблюдалось восстановление моделей. Например, на рисунке 2 наглядно продемонстрирован процесс релаксации полимера ПВС после его деформации. Полимер восстановился только частично в результате расчета системы методом молекулярной динамики.

Далее была промоделирована система композита ПВС – FLG. К ней также была приложена нагрузка и проведен процесс минимизации энергии. Было отмечено, что композит, имеющий «сэндвич» структуру, релаксирует после деформации полностью и намного быстрее, чем сам полимер (рисунок 3).

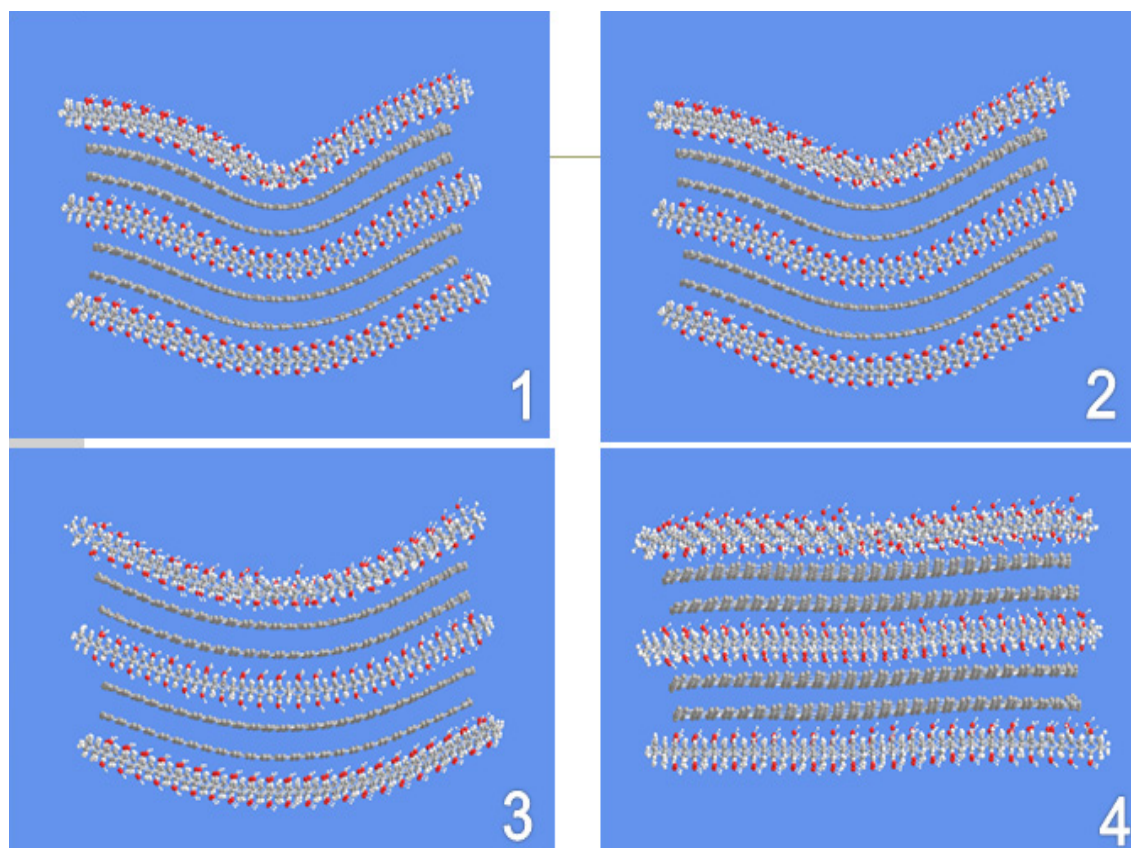


Рисунок 3 – Этапы релаксации деформации модели композита ПВС- FLG

На рисунке 4 представлена компьютерная модель композита с «сэндвич» структурой, где в качестве матрицы выступает полимер ПВС, а в качестве наполнителя облученный FLG с мостиковыми дефектами.

Было установлено, что после деформирования композита с мостиковыми дефектами система композита «полимер – облученный FLG» восстанавливается полностью. Таким образом, можно предположить, что мостиковые дефекты, препятствуя скольжению графеновых слоев, улучшают механические свойства FLG и всего композита в целом.

На рисунке 5 представлены графики изменения потенциальной энергии со време-

нем полимера, композита «ПВС – FLG» и композита «ПВС – FLG с мостиковыми дефектами» после снятия нагрузки вызвавшей деформацию.

Изменение потенциальной энергии полимера ПВС от времени является нестабильным, как показано на рисунке 5. Зависимости потенциальной энергии от времени композитов существенно отличаются от характера поведения полимера. Важно отметить, что потенциальная энергия композита «ПВС –FLG с мостиковыми дефектами» изменяется практически линейно. Это связано с тем, что мостиковые дефекты, упрочняя слои графена между собой, делают всю систему намного жестче.

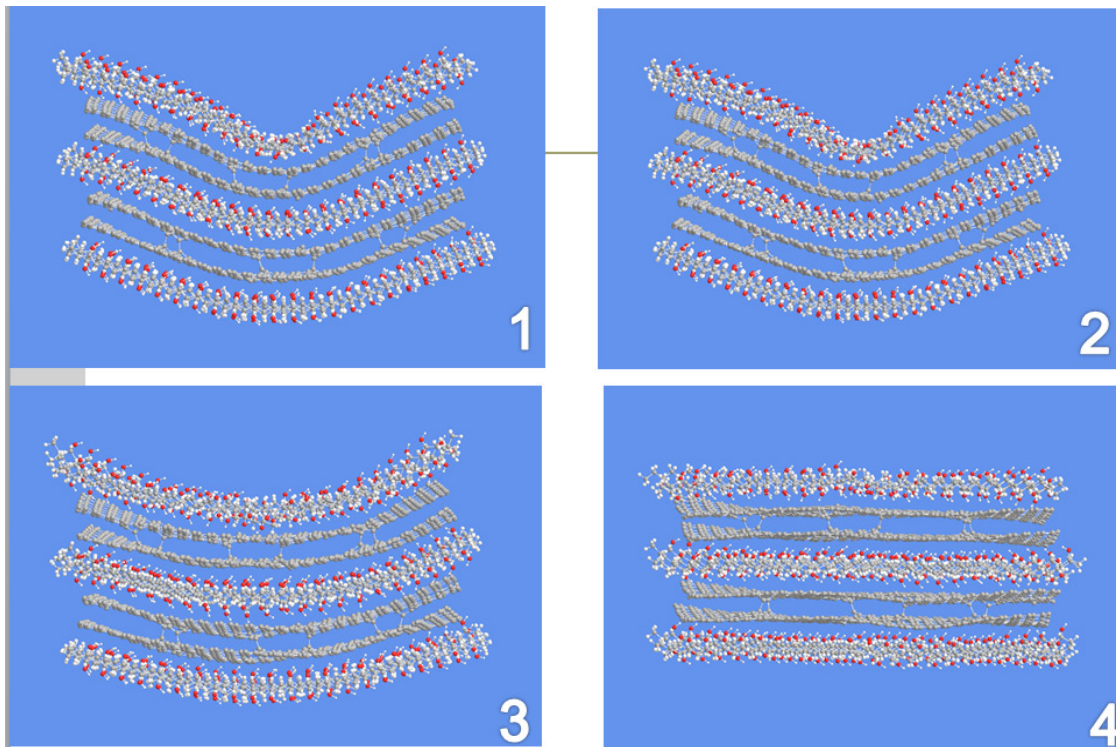


Рисунок 4 – Компьютерная модель релаксации деформации композита ПВС-FLG с мостиковыми дефектами

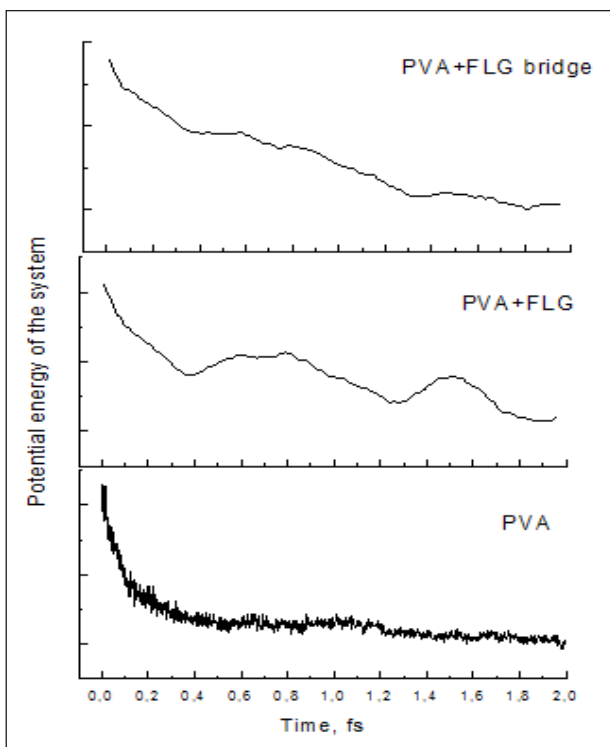


Рисунок 5 – Графики зависимости потенциальной энергии от времени ПВС, композита «ПВС – FLG», композита «ПВС –FLG с мостиковыми дефектами» после снятия нагрузки

### Результаты экспериментов

В рамках данной работы был проведен ряд экспериментов по получению графена и малослойного графена. Все образцы были отобраны с помощью оптической микроскопии (Leica DM6000) и спектроскопии комбинационного рассеяния света (NT-MDT NTegra Spectra). На рисунке 6 показана оптическая микрофотография образца полученного графена.

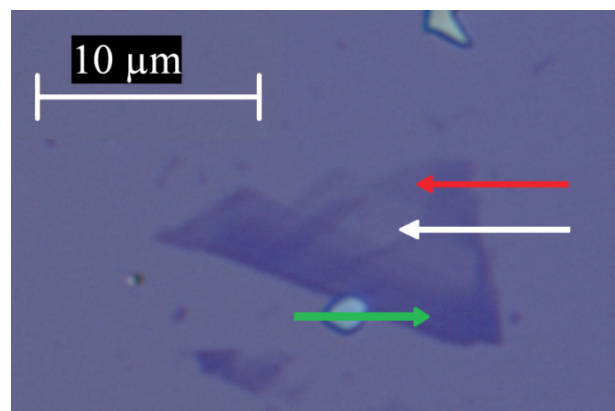


Рисунок 6 – Типичная оптическая микрофотография графена (белая стрелка), малослойного графена (красная) и графита (зеленая) на  $\text{SiO}_2$  подложке

В ходе выполнения работы был проведен ряд исследований по функционализации графеновых структур путем радиационной модификации электронным пучком. Образец был облучен на электронном микроскопе со следующими режимами облучения:  $D=5.37 \cdot 10^{17} \text{ e/cm}^2$ ,  $HV=15 \text{ kV}$ ,  $P=3 \cdot 10^{-3} \text{ Pa}$ . После облучения образец был охарактеризован Раман спектроскопией, которая показала существенное изменение спектра образца после облучения. На рисунке 7 представлены Рамановские спектры исходного и облученного графена.

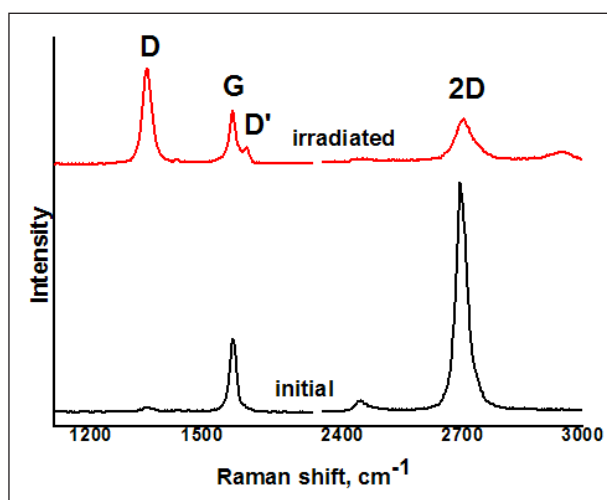


Рисунок 7 – Рамановский спектр графена на SiO<sub>2</sub> до и после облучения с энергией 15 кэВ

На рисунке 7, отчетливо выделяются дополнительные пики D и D', которые свидетельствуют о появлении определенного типа дефектов, в частности вакансий и мостиковых дефектов. В данном случае также стоит отметить появление ступеньки D' рядом с пиком G. Мы интерпретируем этот результат как признак возможного наличия различного рода мостиковых радиационных дефектов [5].

Следующие испытания производились на малослойном графене. На рисунке 8 показаны Рамановские спектры исходного и облученного малослойного графена.

В ходе экспериментов было выявлено, что при воздействии на графен и малослойный графен лазером (при изучении Рамановских спектров), наблюдается изменение интенсивности дефектных пиков D и D'.

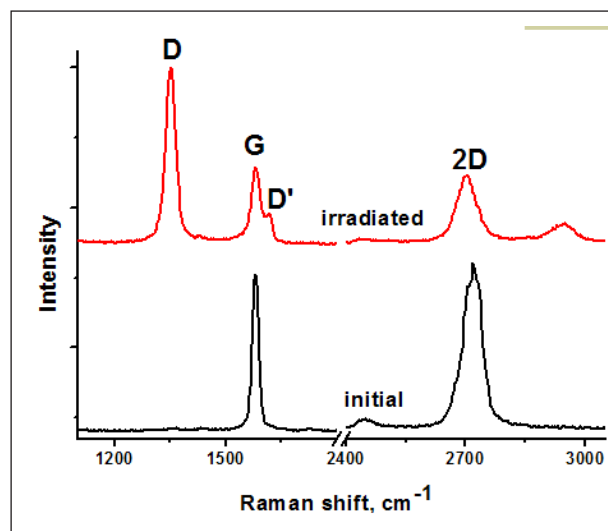


Рисунок 8 – Рамановский спектр FLG на SiO<sub>2</sub> до и после облучения с энергией 15 кэВ

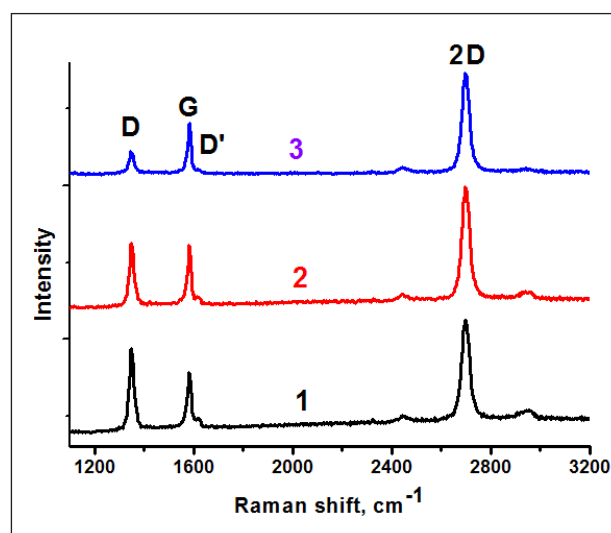
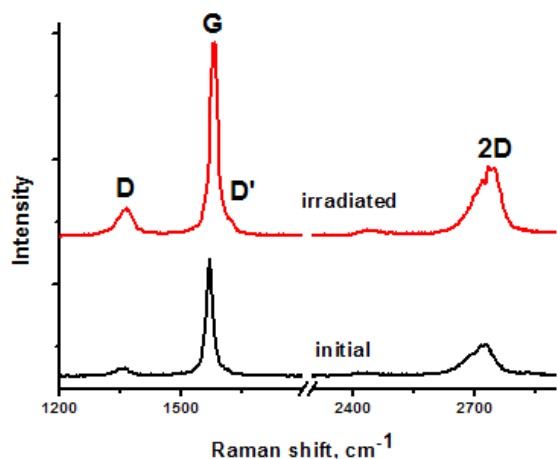


Рисунок 9 – Эволюция Раман спектра облученного графена под действием лазерного освещения

На рисунке 9 видно изменение спектров комбинационного рассеяния облученного графена при освещении лазером длиной волны 473 нм. Этот эффект мы интерпретируем как частичное восстановление дефектной структуры графена под действием лазера. Таким образом, во всех экспериментах была использована спектроскопия комбинационного рассеяния света в качестве основного метода выявления структурных изменений.

Была проведена серия облучения образцов нанопорошка графита, бомбардированных азотом методом ионного травления. Образцы были исследованы спектроскопией комбинационного рассеяния света (рисунок 10).

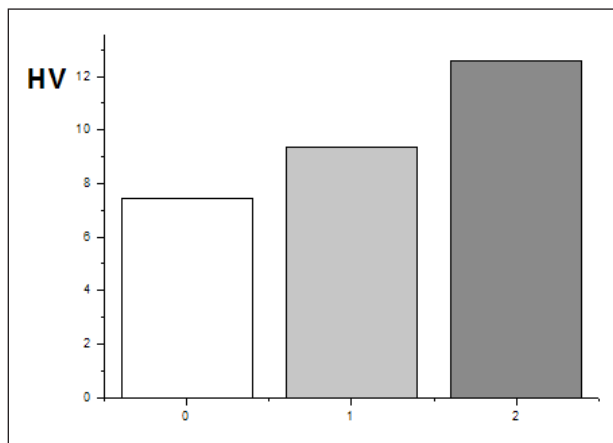


**Рисунок 10** – Рамановские спектры нанопорошка графита до и после облучения N+  
Спектры комбинационного рассеяния света показали появление дефектных пиков D и D'

### Обсуждение результатов

Компьютерным моделированием предсказано, что включение облученных графеновых структур в полимерную матрицу позволяет улучшить механические свойства композитов. Мостиковые дефекты могут связать воедино элементы наноструктур (листы из нескольких слоев графена и трубки в MWCNTs), что делает их намного жестче. В данной работе экспериментально доказано, что использование облученного нанопорошка графита, бомбардированного азотом (NPGirN), в качестве наполнителя в полимерной матрице, позволяет повысить твердость материала. Были приготовлены полимерные композиты с концентрациями наполнителя 5 и 10% нанопорошка графита. На рисунке 11 представлены значения микротвердости по Виккерсу полимера и композитов.

Было установлено, что микротвердость полученного композита с наполнителем из облученного азотом нанопорошка графита увеличивается на 42% по сравнению с необлученным наполнителем из нанопорошка графита даже при малом добавлении наполнителя.



**Рисунок 11** – Гистограмма измерений микротвердости 0 – PVC, 1 – PVC+NPG (5%), 2 – PVC+NPGirN (5%)

### Заключение

В данной работе проведено экспериментальное изучение влияния облучения на структуру и свойства графена, а также созданных на основе графеноподобных структур композитных материалов. Было выявлено, что возможна контролируемая модификация свойств графена, что имеет важное значение для его предлагаемых электронных приложений. В данной работе было выяснено, что также возможно частичное восстановление дефектной структуры графена под действием лазерного освещения.

Облучение проводилось различными способами: бомбардировкой азотом и облучение электронами в сканирующем электронном микроскопе.

С помощью компьютерного моделирования графеновых структур было установлено, что при облучении электронным пучком, возможно формирование мостиковых дефектов в структуре малослойного графена, которые препятствуют скольжению между слоями, что открывает широкие возможности применения данных углеродных наноструктур.

Представленные результаты дают основание полагать, что облучение вызывает структурные дефекты в графене и малослойном графене при различных энергиях.

Таким образом, графен с ‘‘мостиковыми’’ радиационными дефектами, обладая исключительно благоприятным сочетанием физических и механических характеристик с малой плотностью, способен придать материалам новые физико-механические свойства.

### Литература

- 1 Rajatendu Sengupta, Mithun Bhattacharya, S. Bandyopadhyay, Anil K. Bhowmick. A review on the mechanical and electrical properties of graphite and modified graphite reinforced polymer composites // *Progress in Polymer Science*. – 2011. – Vol. 36. – P.638–670.
- 2 Yoo J.J., Balakrishnan K., Huang J., Meunier V., Sumpter B.G., Srivastava A., Conway M., Mohana A.L. Reddy, Yu J., Vajtai R. Ultrathin Planar Graphene Supercapacitors // *Nano Letters*. – 2011. – Vol. 11. – P.1423–1427.
- 3 Liu C., Yu Z., Neff D., Zhamu A., Jang B.Z. Graphene-Based Supercapacitor with an Ultrahigh Energy Density // *Nano Lett.* – 2010. – Vol.10(12). – P.4863–4868.
- 4 Lian P.C., Zhu X.F., Liang S.Z., Li Z., Yang W.S., Wang H.H. Large reversible capacity of high quality graphene sheets as an anode material for lithium-ion batteries // *Electrochimica Acta*. – 2010. – Vol.55. – P.3909–3914.
- 5 Ilyin A.M. Computer simulation of radiation defects in graphene and relative structures, in: J.R. Gong (Ed.), *Graphene Simulation*, InTech, 2011. – P. 39–52.
- 6 Ilyin A.M., Beall G.W., Tsyganov I.A. Simulation and Study of Bridge-Like Radiation Defects in the Carbon Nano-Structures // *J. Comput. Theor. Nanosci.* – 2010. – Vol.7(10). – P.2004–2007.

### References

- 1 R. Sengupta, M. Bhattacharya, S. Bandyopadhyay, A. K. Bhowmick, *Progress in Polymer Science*, 36, 638–670. (2011)
- 2 J.J. Yoo, K. Balakrishnan, J. Huang, V. Meunier, B.G. Sumpter, A. Srivastava, M. Conway, A.L. Mohana Reddy, J. Yu, R. Vajtai, *Nano Letters*, 11, 1423–1427, (2011).
- 3 C. Liu, Z. Yu, D. Neff, A. Zhamu, B.Z. Jang, *Nano Lett.*, 10(12), 4863–4868, (2010).
- 4 P.C. Lian, X.F. Zhu, S.Z. Liang, Z. Li, W.S. Yang, H.H. Wang, *Electrochimica Acta*, 55, 3909–3914, (2010).
- 5 A.M. Ilyin. Computer simulation of radiation defects in graphene and relative structures, in: J.R. Gong (Ed.), *Graphene Simulation*, InTech, 2011, pp. 39–52.
- 6 A.M. Ilyin, G.W. Beall, I.A. Tsyganov, *J. Comput. Theor. Nanosci.* 7(10), 2004–2007, (2010).

Бакранова Д.И., Кукушкин С.А.,  
Нусупов К.Х., Осипов А.В.,  
Бейсенханов Н.Б.

**Структура и фазовый состав  
эпитаксиальных пленок SiC,  
выращенных методом  
замещения атомов**

Bakranova D.I., Kukushkin S.A.,  
Nussupov K.Kh., Osipov A.V.,  
Beisenkhanov N.B.

**The structure and phase  
composition of SiC epitaxial  
films, synthesized by atoms  
replacement**

Бакранова Д.И., Кукушкин С.А.,  
Нусупов К.Х., Осипов А.В., Бей-  
сенханов Н.Б.

**Атомдардың орнын басу  
әдісімен синтезделген  
эпитаксиалды SiC  
қабыршақтарының құрылымы  
және фазалық құрамы**

В данной работе методами рентгеновской дифракции, электронографии, атомно-силовой микроскопии и рамановской микроскопии исследованы структура, фазовый состав и микроструктура поверхности пленки SiC, синтезированной методом замещения атомов в высокоомном c-Si ориентации (111) в смеси газов CO и SiH<sub>4</sub> (264 Па, 1250 °C, 15 мин). Показано, что пленка 3C-SiC является эпитаксиальной и не содержит двойников на поверхности, имеет пирамидальную структуру поверхности с колебаниями высоты до 19 нм с отчетливой фрагментацией зерен размером от 100 до 200 нм. Определены поперечные размеры крупных кристаллов (85 × 110 мкм) и средние размеры нанокристаллов β-SiC (3 – 7 нм) с совершенной структурой в переходной области «пленка-подложка». Показано отсутствие крупных царапин на поверхности пленки SiC. Развитая кристаллическая поверхность пленки свидетельствует об образовании высококачественных кристаллов SiC за счет залечивания усадочных пор в течение длительного (15 мин) высокотемпературного синтеза.

**Ключевые слова:** тонкие пленки, карбид кремния, дилатационный диполь, структура, кристаллизация

In this paper, using X-ray diffraction, electron diffraction, atomic force microscopy and Raman microscopy the structure, phase composition and surface microstructure of SiC films, synthesized by substitution of atoms in a high-resistivity (111) oriented c-Si in a gas mixture of CO and SiH<sub>4</sub> (264 Pa, 1250 °C, 15 min) are studied. It is shown that 3C-SiC film is epitaxial and does not contain twins on the surface, the surface has a pyramidal structure with height variations up to 19 nm with a distinct fragmentation of grains with sizes of 100 to 200 nm. It is defined lateral dimensions of large crystals (85 × 110 μm) and average sizes of β-SiC nanocrystals (3 – 7 nm) with perfect structure in the transition region «film-substrate». An absence of large scratches on the SiC film surface is demonstrated. The developed crystalline surface of the film indicates the formation of high-quality SiC crystals due to the healing of contraction pores during a long time (15 min) high-temperature synthesis.

**Key words:** thin films, silicon carbide, dilatation dipoles, structure, crystallization

Бұл жұмыста, CO және SiH<sub>4</sub> (264 Па, 1250 °C, 15 мин) газ қоспаларының атмосферасында (111) бағдарлы жоғарыомды c-Si-дегі атомдардың орнын басу әдісімен синтезделген SiC қабыршақ бетінің құрылымы, фазалық құрамы және микроқұрылымы рентгендік дифракция, электронография, атомдық күштік микроскопия және рамандық микроскопия әдістерімен зерттелген. 3C-SiC қабыршақ эпитаксиялды және бетінде телқосақтар жоқ екендігі көрсетілген, биіктігінің тербелісі 19 нм дейін жететін пирамида тәрізді беті және анық фрагменттеуі бар 100-ден 200 нм-ге дейін мөлшерлі түйірі бар. «Қабыршақ-матрица» өтпелі аймақтағы жетілген құрылымы бар ірі кристалдардың (85 × 110 мкм) көлденең мөлшері және β-SiC нанокристалдарының (3 – 7 нм) орташа мөлшері анықталды. SiC қабыршақтың бетінде ірі сызаттардың жоқ болғаны көрсетілген. Қабыршақтың дамыған кристалдық бетінің болуы, ұзақ уақыт бойы (15 мин) жоғары температуралы синтездеу барысында шөгінді саңылауларды қалпына келтіру есебінен жоғары сапалы SiC кристаллдарының құрылғандығын көрсетеді.

**Түйін сөздер:** жұқа қабыршақ, кремний карбиді, дилатациондық диполь, құрылым, кристалдану

## СТРУКТУРА И ФАЗОВЫЙ СОСТАВ ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ ПЛЕНОК SiC, ВЫРАЩЕННЫХ МЕТОДОМ ЗАМЕЩЕНИЯ АТОМОВ

### Введение

Карбид кремния (SiC) ввиду уникальных физико-химических свойств является одним из наиболее перспективных материалов для применения в опто- и микро-электронике [1,2]. Широкому технологическому распространению карбида кремния препятствуют проблемы получения бездефектных монокристаллических слоев большой площади по приемлемой цене. Большими преимуществами обладает метод получения карбида кремния эпитаксией на подложках кремния [3]. Аморфные и кристаллические пленки SiC также находят применение при создании солнечных элементов [4,5].

В последние годы получил распространение новый метод синтеза тонких низкодефектных пленок карбида кремния на кремнии [6,7]. Метод заключается в замене части атомов матрицы кремния на атомы углерода с образованием молекул карбида кремния:  $2\text{Si} + \text{CO} = \text{SiC} + \text{SiO}$ . При взаимодействии между внедренным в межузельную позицию атомом углерода и кремниевой вакансией  $V_{\text{Si}}$ , образующейся при удалении соседнего атома кремния, в решетке Si образуются дилатационные диполи (C– $V_{\text{Si}}$ ). В процессе синтеза диполи распадаются на пленку карбида кремния и поры [8] под ее поверхностью.

В данной работе проведено исследование структуры, фазового состава и микроструктуры поверхности эпитаксиальной пленки SiC, выращенной методом замещения атомов, на поверхности высокоомного монокристаллического кремния n-типа ориентации (111).

### Эксперимент

В качестве подложек были использованы высококачественные пластины монокристаллического кремния c-Si ориентации (111) n-типа с удельным сопротивлением 1987 – 3165 Ом·см, диаметром 20 мм и толщиной 1300 мкм. Обе стороны пластины кремния были подвергнуты двухсторонней шлифовке и полировке до обретения зеркального блеска с удалением по 100 мкм. Затем было удалено по 115 мкм с каждой стороны химическим травлением в смеси кислот в соотношении HF :

$\text{HNO}_3 = 1 : 10$ , а затем протравлены в щелочном растворе KOH.

Пленки карбида кремния были синтезированы в специальной установке, описанной в [7,9]. Партия образцов была выращена в течение 15 мин при температуре  $1250^\circ\text{C}$  и давлении газа CO 264 Па. Для интенсификации процессов образования SiC и улучшения качества слоя за счет залечивания усадочных пор вместе с газом CO был использован газ силан  $\text{SiH}_4$  [6,7]. Расход газа CO составлял 12 сссм, а расход газа  $\text{SiH}_4 - 0,25$  сссм.

Фазовый состав и структура пленок исследовались методом высокочувствительной фотографической рентгеновской дифракции с использованием узкоколлимированного ( $0,05 \times 1,5 \text{ mm}^2$ ) монохроматического ( $\text{CuK}_\alpha$ ) пучка рентгеновских лучей, направленного под углом

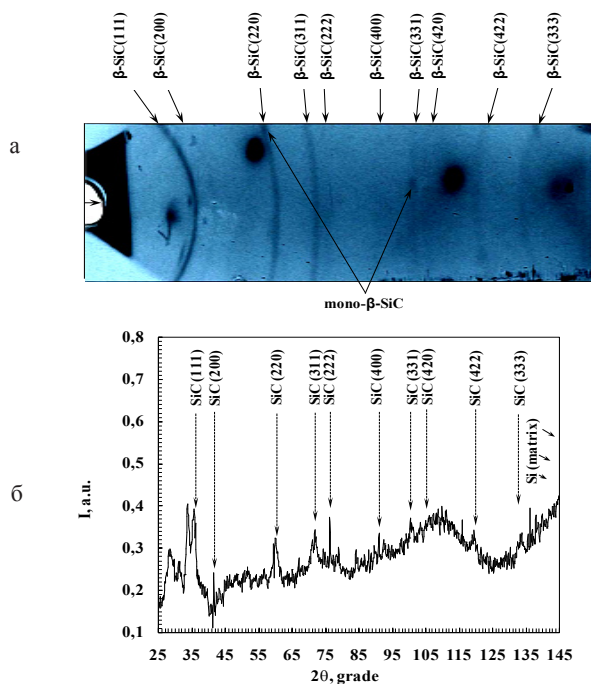
где  $\varepsilon$  – средний размер кристаллита (нм);  $R = 2,86 \text{ см}$  – радиус камеры (см);  $\lambda = 0,1540 \text{ нм}$  – длина волны  $\text{CuK}_\alpha$ -излучения (нм);  $\beta$  – уширение линии. Величина уширения рентгеновской линии  $\beta$  определена из выражения  $\beta = \sqrt{\beta_s \beta_w}$  [14],  $\beta_s = B - b$  [13],  $\beta_w = \sqrt{B^2 - b^2}$  [15], где  $B$  – полуширина рентгеновской линии с поправкой на дублетность линии  $\text{CuK}_\alpha$ ,  $b$  – инструментальная составляющая полуширины линии.

Размеры нанокристаллов SiC составили величины 3,1 нм в плоскости (111), 4,7 нм в плоскости (220) и 7,3 нм в плоскости (311). Слой SiC, сформированный методом замещения атомов, состоит из слоя пленки SiC, покрывающей треугольные поры, находящиеся под ее поверхностью, и усадочных пор, расположенных вдоль поверхности подложки. При большем значении пересыщения критический радиус зародыша SiC, окруженного вакансионными кластерами [7], имеет размер порядка нескольких нанометров. Таким образом, установлено, что окруженный вакансионными кластерами зародыш SiC в переходной области «пленка-подложка» имеет размеры в пределах 3 – 7 нм.

С помощью метода *Clark и Zimmer* определения размеров нанокристаллов, основанного на измерении размеров рефлексов, были определены размеры крупных кристаллов  $\beta$ -SiC. Согласно этому методу, изменение размеров рефлексов на дебаеграмме от 0,20 до 1,20 мм соответствуют линейному изменению размеров зерен от 10 до 85 мкм. Размеры кристаллов составили величины  $85 \times 110 \text{ мкм}$  в плоскости (220),  $85 \times 120 \text{ мкм}$  в плоскости (331). При этом толщины пленок SiC, синтезированных методом замещения атомов, обычно не превосходят 100-150 нм [6].

На рис. 2 представлены электронограммы пленки SiC на поверхности образца, полученные в направлениях азимута [110] и [112]. Точечные рефлексы на электронограммах свидетельствуют о том, что слой 3C-SiC с ориентацией (111) лежит на поверхности Si, и направление [111] этого слоя перпендикулярно поверхности подложки. Видно, что пленки карбида кремния являются эпитаксиальными и не содержат двойников на поверхности [16].

Также на электронограмме (рис. 2 б) хорошо видно, что вдоль направления [112] поверхность образца имеет реконструкцию, соответствующую  $3 \times 3$  вдоль направления [112]. Тяжи, соответствующие реконструированной поверхности указаны стрелкой. Отметим, что подобная реконструкция наблюдалась в пленках 3C-SiC, вы-



**Рисунок 1** – Дебаеграмма (а) и кривая интенсивности (б) рентгеновских отражений  $I(2\theta)$  тонкой пленки карбида кремния, синтезированной методом замещения атомов

С помощью метода Джонса [12] были определены средние размеры нанокристаллов  $\beta$ -SiC в различных плоскостях в переходной области «пленка-подложка» по формуле Шеррера [13]

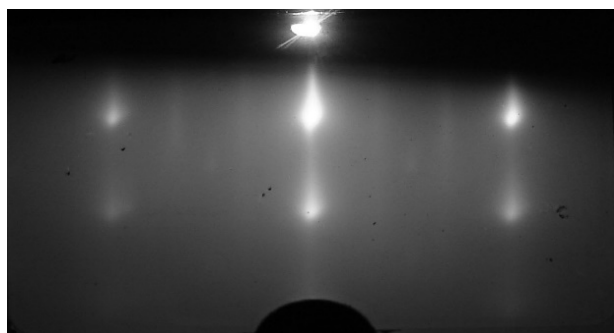
$$\varepsilon = \frac{R\lambda}{\beta \cdot \cos \theta}, \quad (1)$$



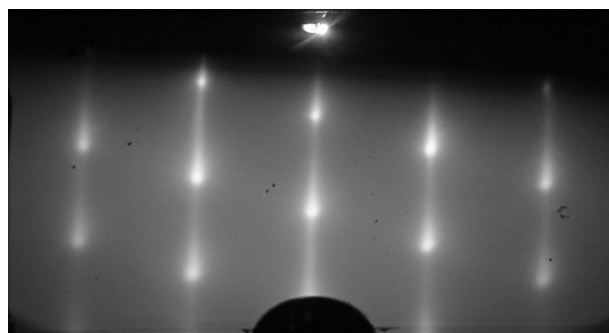
ращенных стандартным методом CVD на Si [17] и выращенных в Si методом замещения атомов [18].

Анализ фотографий поверхности пленки карбида кремния с 1000-кратным увеличением на рис.3 показывает, что поверхность пленки SiC состоит из однородных участков без крупных царапин, но содержащих крапинки, имеющие на рисунке темно-фиолетовый цвет. Крапинки по своей природе являются ямками травления и углублениями на поверхности, так как поверхность подложки кремния была подвергнута об-

работке в смеси кислот  $\text{HF}:\text{HNO}_3$  с удалением глубоких царапин и повреждений поверхности. Количество ямок травления на площади  $10 \times 5,3$  мкм составило 118. Поперечные размеры ямок лежат в пределах 200–400 нм, при этом многие из них имеют удлиненную форму с длиной до 700–900 нм. Ямки травления на поверхности кремния могут оказать влияние на качество структуры растущей пленки карбида кремния. В связи с этим, представляет особый интерес дополнительное изучение поверхности методом атомно-силовой микроскопии.



а



б

Рисунок 2 – Электронограммы пленки SiC, снятые в азимутах [110] (а) и [112] (б)

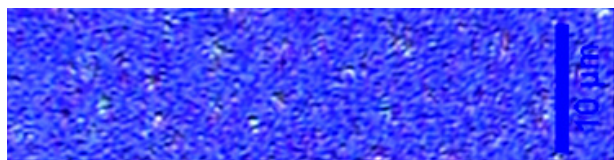


Рисунок 3 – Фотография поверхности с 1000-кратным увеличением кристаллической пленки SiC на кремниевой подложке

Методом АСМ показано (рис. 4), что синтезированные пленки SiC имеют пирамидальную структуру поверхности с колебаниями высоты до 19 нм, с отчетливой фрагментацией зерен размером от 100 до 200 нм и это обусловлено оптимальной температурой процесса синтеза, способствующей формированию совершенной кристаллической структуры пленок карбида кремния. Светлый окрас имеют выступающие участки поверхности, темную окраску имеют низкие участки поверхности, с которых начинается отсчет высоты. Развита кристаллическая поверхность пленки

свидетельствует не только о синтезе карбида кремния на границе «пленка-подложка», но и об одновременном структурном упорядочении поверхности и образовании на ней высококачественных кристаллов SiC за счет залечивания усадочных пор в течение длительного времени (15 мин) при добавлении силана  $\text{SiH}_4$  к газу CO. Действительно, авторами [7] сообщалось, что при увеличении времени синтеза из-за эффекта внутреннего выдавливания нижними слоями, верхние слои начинают выступать наружу пленки и шероховатость пленок увеличивается.

В частности, центральная часть поверхности на рис. 4 имеет темный окрас и глубину до 19 нм. Размеры углубления составляют  $\sim 250 \times 350$  нм и приблизительно соответствуют поперечным размерам ямок травления 200-400 нм, указанных выше. Таким образом, можно утверждать, что выполнена оценка величины глубины ямок травления, составившая около 20 нм. При этом, микроструктура поверхности имеет отчетливую фрагментацию зерен.

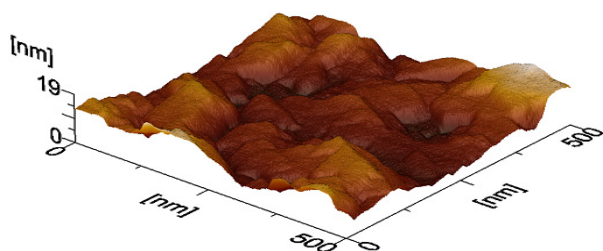


Рисунок 4 – Атомно-силовая микроскопия поверхности пленки SiC на участке размером 500 × 500 нм

### Заключение

Синтезированы нанослои SiC на поверхности высокоомных монокристаллических пластин кремния ориентации (111) методом замещения атомов в кристаллической решетке кремния на атомы углерода. Выявлено формирование кристаллической фазы  $\beta$ -SiC (3C-SiC) в пленках, синтезированных при температуре 1250°C в смеси газов CO и SiH<sub>4</sub> (264 Па) в течение 15 минут.

Определены поперечные размеры крупных кристаллов  $\beta$ -SiC, которые составили величины 85×110 мкм в плоскости (220) и 85×120 мкм в плоскости (331). Также определены средние размеры нанокристаллов  $\beta$ -SiC с совершенной структурой в переходной области «пленка-подложка», составившие величины 3,1 нм в плоскости (111), 4,7 нм в плоскости (220) и 7,3 нм в плоскости (311). Установлено, что окружен-

ные вакансионными кластерами зародыши SiC в переходной области «пленка-подложка» имеют размеры в пределах 3 – 7 нм.

Показано отсутствие крупных царапин на поверхности пленки SiC. Выполнена оценка размеров углублений на поверхности пленки SiC, появившихся в результате травления поверхности подложки кремния в смеси кислот HF:HNO<sub>3</sub>, составивших в среднем ~ 20 × 200 × 400 нм. Показано, что пленки 3C-SiC являются эпитаксиальными и не содержат двойников на поверхности, имеют пирамидальную структуру поверхности с колебаниями высоты до 19 нм, с отчетливой фрагментацией зерен размером от 100 до 200 нм и это обусловлено оптимальной температурой процесса синтеза. Развитая кристаллическая поверхность пленки свидетельствует не только о синтезе карбида кремния на границе «пленка-подложка», но и об одновременном структурном упорядочении поверхности и образовании на ней высококачественных кристаллов SiC за счет залечивания усадочных пор в течение длительного времени (15 мин) высокотемпературного синтеза при добавлении силана SiH<sub>4</sub> к газу CO.

*Бейсенханов Н.Б., Нусупов К.Х. и Бакранова Д.И. выражают благодарность Комитету науки МОН РК за финансовую поддержку (гранты ГР № 0262/ГФ4; ГР № 4327/ГФ4; 2015–2017 гг.).*

*Кукушкин С.А. и Осипов А.В. выражают благодарность РФФИ за финансовую поддержку (гранты № 15-0306155 и 16-29-03149\_2016-офи).*

### Литература

- 1 Choyke W.J., Matsunami H.M., Pensl G. Silicon carbide. A. Review of fundamental questions and application to current device technology. – Berlin: Akademie, 1998. – V. I, II.
- 2 Fissel A. Artificially layered heteropolytypic structures based on SiC polytypes: molecular beam epitaxy, characterization and properties // Phys. Rep. – 2003. – Vol.379. – P.149-155.
- 3 Nishino S., Powell J.A., Will H.A. Production of large-area single-crystal wafers of cubic SiC for semiconductor devices // Appl. Phys. Lett. – 1983. – Vol. 42. – P.460.
- 4 Hamakawa Y. Physics and Applications of Amorphous Silicon Carbide. In: Rahman MM., Yang CY-W, Harris GL (Eds.), Amorphous and Crystalline Silicon Carbide II, Springer Proceedings in Physics, 1989. – Vol. 43. – P. 164–170.
- 5 Joung Y-H., Kang H.I., Kim J.H., Lee H-S, Lee J. and Choi W.S. SiC formation for a solar cell passivation layer using an RF magnetron co-sputtering system // Nanoscale Research Letters. – 2012. – Vol. 7(1). – P.22.
- 6 Kukushkin S.A. and Osipov A.V. Theory and practice of SiC growth on Si and its applications to wide-gap semiconductor films // J. of Phys. D: Appl. Phys. – 2014. – Vol.47. –P.313001-313041.
- 7 Kukushkin S.A., Osipov A.V., and Feoktistov N.A. Synthesis of epitaxial silicon carbide films through the substitution of atoms in the silicon crystal lattice: A review // Physics of the Solid State. – 2014. – Vol.56(8). – P.1507–1535.
- 8 Kukushkin S.A., Osipov A.V. A new method for the synthesis of epitaxial layers of silicon carbide on silicon owing to formation of dilatation dipoles // J. Appl. Phys. – 2013. – Vol.113(2) – P.024909-1-024909-7.
- 9 Кукушкин С.А., Осипов А.В., Феоктистов Н.А. Способ изготовления изделия, содержащего кремниевую подложку с пленкой из карбида кремния на ее поверхности. – Патент на изобретение № 2363067, 2008.

- 10 Nussupov K.Kh., Beisenkhanov N.B. in: Moumita Mukherjee, Silicon carbide – Materials // Processing and Applications in Electronic Devices, InTech, 2011. – P.69–114.
- 11 Nussupov K.Kh., Beisenkhanov N.B., Valitova I.V., Mit' K.A., Mukhamedshina D.M., Dmitrieva E.A. Structure properties of carbon implanted silicon layers // J. of Materials Science: Materials in Electronics. – 2008. – Vol.19. – P.254–262.
- 12 Jones F.W. The measurement of particle size by the X-ray method // Proc. Roy. Soc., London. – 1938. – 166A. – P. 16–43.
- 13 Scherrer P. Bestimmung der Grösse und der inneren Struktur von Kolloidteilchen mittels Röntgenstrahlen // Nachr. Ges. Wiss. Göttingen. – 1918. – Vol. 26. – P. 98–100.
- 14 Taylor A. X-ray Metallography. John Wiley & Sons, New York – London, 1961. – 993p.
- 15 Warren B.E., Bischof J. // Journal of American Ceramic Society. – 1938. – Vol.21(1) P.49–54.
- 16 Bakranova D.I., Kukushkin S.A., Nussupov K.Kh., Osipov A.V., Beisenkhanov N.B. Epitaxial Silicon Carbide Films Grown by New Method of Replacement of Atoms on the Surface of High-resistivity (111) Oriented Silicon // MATEC Web of Conferences New York. – 2016. – Vol. 43. – P.01003.
- 17 Pezoldt J., Kups T., Stauden T., Schroter B. Polarity determination and control of SiC grown on Si // Materials Science and Engineering B. – 2009. – Vol.165. – P. 28–33.
- 18 Benemanskaya G.V., Dementev P.A., Kukushkin S.A., Lapushkin M.N., Osipov A.V., Senkovskiy B., Timoshnev S.N. Photoemission study of nano SiC epitaxial layers synthesized by a new method of the atom substitution in Si crystal lattice // Materials Physics and Mechanics. – 2015. – Vol.22. –P.183-190.

### References

- 1 W.J. Choyke, H.M. Matsunami, G. Pensl Silicon carbide, A. Review of fundamental questions and application to current device technology. Akademie, Berlin. V. I, II. (1998)
- 2 A. Fissel, Phys. Rep. 379, 149-155. (2003)
- 3 S. Nishino, J.A.Powell, H.A. Will, Appl. Phys. Lett. 42, 460. (1983)
- 4 Y. Hamakawa, Physics and Applications of Amorphous Silicon Carbide. In: Rahman M.M., Yang CY-W., Harris G.L. (Eds.), Amorphous and Crystalline Silicon Carbide II, Springer Proceedings in Physics. 43, 164–170. (1989)
- 5 Y.-H. Joung, H.I. Kang, J.H. Kim, H.-S. Lee, J. Lee and W.S. Choi, Nanoscale Research Letters 7(1):22. (2012).
- 6 S.A. Kukushkin, and A.V. Osipov, J. of Phys D: Appl. Phys. 47, 313001-313041. (2014).
- 7 S.A. Kukushkin, A.V. Osipov, and N.A. Feoktistov, Physics of the Solid State, 56(8), 1507–1535. (2014).
- 8 S.A. Kukushkin, A.V. Osipov, J. Appl. Phys. 113 (2), 024909-1-024909-7. (2013).
- 9 S.A. Kukushkin, A.V. Osipov and N.A. Feoktistov, Method of manufacturing an article comprising a silicon substrate with a silicon carbide film on its surface Patent № 2363067 (in Russian). (2008)
- 10 K.Kh. Nussupov, N.B. Beisenkhanov, in: Moumita Mukherjee, Silicon carbide – Materials, Processing and Applications in Electronic Devices, InTech, pp. 69–114. (2011).
- 11 K.Kh. Nussupov, N.B. Beisenkhanov, I.V. Valitova, K.A. Mit', D.M. Mukhamedshina, E.A. Dmitrieva, J. of Materials Science: Materials in Electronics, 19, 254–262. (2008).
- 12 F.W. Jones, The measurement of particle size by the X-ray method. Proc. Roy. Soc., London 166A, 16–43. (1938).
- 13 P. Scherrer, Bestimmung der Grösse und der inneren Struktur von Kolloidteilchen mittels Röntgenstrahlen. Nachr. Ges. Wiss. Göttingen, 26, 98-100. (1918).
- 14 A. Taylor, X-ray Metallography. John Wiley & Sons, New York – London, 993p. (1961).
- 15 B.E. Warren, J. Bischof, Journal of American Ceramic Society, 21(1), 49–54. (1938).
- 16 D.I. Bakranova, S.A. Kukushkin, K.Kh. Nussupov, A.V. Osipov, N.B. Beisenkhanov Epitaxial Silicon Carbide Films Grown by New Method of Replacement of Atoms on the Surface of High-resistivity (111) Oriented Silicon, MATEC Web of Conferences 43, New York. P.01003. (2016).
- 17 J. Pezoldt, T. Kups, T. Stauden, B. Schroter, Materials Science and Engineering B, 165, 28–33. (2009).
- 18 G.V. Benemanskaya, P.A. Dementev, S.A. Kukushkin, M.N. Lapushkin, A.V. Osipov, B. Senkovskiy, S.N. Timoshnev, Materials Physics and Mechanics, 22, 183-190. (2015)

Мұрадов А.Д.,  
Яр-Мухамедова Г.Ш.,  
Мұхамбетова С.Б.,  
Черязданов К.Б.,  
Әмірханова К.М., Әлиева Ж.А.

**Полиимидті қабыршақтың  
морфологиясына,  
оптикалық қасиеттеріне,  
молекулалық құрылымына  
шунгит толықтырғышының  
концентрациясының әсері**

Ұсынылған жұмыста полиимидті қабыршақтың морфологиясына, оптикалық қасиеттеріне, молекулалық құрылымына шунгит толықтырғышының концентрациясының әсері зерттелді. Шунгитті төрт түрлі концентрацияда қолдандық. Алынған барлық үлгілерде концентрацияға байланысты өзгерістерді байқауға болады. Концентрация артқан сайын бет соғұрлым тегіс болады. Толықтырғыш қосу қабыршақтың фотолюменесценциялық спектріне қатты әсер етпейді, спектрдің бұндай болуы полиимидтің радиацияға жоғары тұрақтылығымен сипатталады. Полиимидтің негізгі қасиеттеріне ыстыққа төзімділік, жылуға шыдамдылық, радиацияға тұрақтылығы, органикалық ерітінділерге тұрақтылығы және басқа да бағалы қасиеттері жатады. Қабыршақтардың құрылымдық элементтеріне талдау жасау үшін комбинационды шашырау әдісі қолданылды. Полиимидті қабыршақтардың беттік морфологиясын зерттеу атомдық күштік микроскоптың көмегімен жүзеге асырылды. Ал шунгит толықтырғышының өлшемдерін оптикалық микроскоп Leica DM 6000 M көмегімен анықтадық. Және де шунгиттің концентрациясының әртүрлілігіне байланысты жарықты өткізу коэффициенттерінің өзгеріс графигі келтірілген. Сонымен қатар полиимид үшін қалыпты жағдайда механикалық кернеудің, механикалық салмақтың полиимидке әсерін зерттеу әдісі және полиимидтің физикалық шамасы қарастырылды. Жүргізілген негізгі зерттеулер нәтижесінде полиимидті қабыршақтардың беріктік қасиеттері, оптикалық қасиеті және тағы да басқа қасиеттерінің өзгеруі толықтырғыштың түрімен қатар оның концентрациясына да тәуелді екенін анықтадық. Шунгит толықтырғыштан тұратын полимерлі композитті материал үлгілерінің физикалық қасиеттері полиимид қабыршақтың концентрациясына, қабыршақ қалыңдығына тікелей тәуелді.

Түйін сөздер: полиимидті қабыршақ, шунгит толықтырғышы, раман-спектроскопия, атомдық-күштік микроскопия, оптикалық микроскоп.

Muradov A.D.,  
Yar-Mukhamedova G.Sh.,  
Mukhambetova S.B.,  
Cheryazdanov K.B.,  
Amyr Khanova K.M., Alyeva Zh.A.

**Investigation of the influence of  
the concentration of the shungite  
filler on the optical properties,  
morphology and molecular  
structure of the polyimide film**

In the present work, the influence of the concentration of shungite filler on surface morphology, optical properties, molecular structure of polyimide films was investigated. Shungite was used in four different concentrations. In all the samples obtained, changes can be traced depending on the concentration of the filler. The surface of the film becomes smoother with increasing filler concentration. The addition of filler does not greatly affect the photoluminescent spectrum of the films, since the polyimide has a high resistance to radiation. One of the main properties of polyimide is high resistance to heat, resistance to radiation, stability in organic solutions and other valuable properties. For the analysis of structural elements, the Raman scattering method was used. Investigation of the morphology of the surface of polyimide films is carried out using an atomic force microscope. The size of the shungite filler was determined using an optical microscope Leica DM 6000 M. Due to the inhomogeneity of shungite concentrations, a graph of the change in the transmission coefficient of light is given. Under normal conditions of mechanical stress, as well as for polyimide, mechanical and physical quantities, methods for studying the influence of mechanical weight are considered. As a result of studies of the strength of a polyimide film, as well as a change in the optical properties, we determined that the optical and mechanical properties of polyimide films depend not only on the appearance of the filler but also on its concentration.

**Key words:** polyimide film, classification of fillers, Raman spectroscopy, atomic force microscopy, optical property.

Мұрадов А.Д.,  
Яр-Мухамедова Г.Ш.,  
Мұхамбетова С.Б.,  
Черязданов К.Б.,  
Амирханова К.М., Әлиева Ж.А.

**Исследование влияние концен-  
трации наполнителя шунгита  
на оптические свойства, на  
морфологию и молекулярную  
структуру полиимидной пленки**

В представленной работе были исследованы влияние концентрации наполнителя шунгита на морфологию поверхности, оптические свойства, молекулярную структуру полиимидных пленок. Был использован шунгит четырех разных концентраций. Во всех полученных образцах можно проследить изменения в зависимости от концентрации наполнителя. Поверхность пленки становится более гладкой с увеличением концентрации наполнителя. Добавление наполнителя не сильно влияет на фотолюменесцентный спектр пленок, так как полиимид обладает высокой стойкостью к радиации. Одними из основных свойств полиимида является высокая стойкость к жаре, устойчивость к радиации, стабильность в органических растворах и другие ценные свойств. Для анализа структурных элементов использовался метод комбинационного рассеяния света. Исследование морфологии поверхности полиимидных пленок осуществляется с помощью атомного силового микроскопа. Определение размеров шунгитного наполнителя проводилось с помощью оптического микроскопа Leica DM 6000 M. В связи с неоднородностью концентраций шунгита приведен график изменения коэффициента пропускания света. В нормальных условиях механического напряжения, а также для полиимида, механических и физических величин, рассмотрены методы исследования влияния механического веса. В результате проведенных исследований прочности полиимидной пленки, а также изменение оптических свойств, мы определили что оптические и механические свойства полиимидных пленок зависят не только от видв наполнителя, но и от его концентрации.

**Ключевые слова:** полиимидная пленка, классификация наполнителей, раман-спектроскопия, атомно-силовая микроскопия, оптические свойство.

**ПОЛИИМИДТІ  
ҚАБЫРШАҚТЫҢ  
МОРФОЛОГИЯСЫНА,  
ОПТИКАЛЫҚ  
ҚАСИЕТТЕРІНЕ,  
МОЛЕКУЛАЛЫҚ  
ҚҰРЫЛЫМЫНА  
ШУНГИТ  
ТОЛЫҚТЫРҒЫШЫ-  
НЫҢ КОНЦЕНТРАЦИЯ-  
СЫНЫҢ ӘСЕРІ**

**Кіріспе**

Соңғы кездері ғылымның, техниканың дамуына байланысты материалдардың жаңа түрі – полимерлі композитті материалдарға деген қызығушылық жоғары деңгейде дамып келеді. Қазіргі кезде қолданылып жүрген полимерлі композиттік материалдар (ПКМ) жалпы қасиеттері мен олардан жасалатын заттардың түріне, сондай-ақ өндіру әдісіне қарай бөлінеді [1-2]. ПКМ-ның ішіндегі кең таралған материалдың бір түрі полиимидті қабыршақтар. Полиимидтер (ПМ) – ароматты диаминдер мен ароматты тетракарбонды қышқыл негізіндегі жылуға тұрақты поликонденсационды полимерлер [1]. Полиимидтердің алынуына тоқталатын болсақ, олар бірінші стадиясында полиамидоқышқыл (концентрациясы 10-25%) түзіле жүретін инертті ерітінді ортасында диаминдер мен тетракарбонды қышқылдардың ангидридін поликонденсациясы арқылы алынады. Осы полиимидтер негізінде 493 К-ге дейін шыдамдылыққа ие болатын электроизоляциялық материалдардың жаңа тобы пайда болды.

Біздің жұмысымызда алдымызға қойылған негізгі мақсатымыз полиимидті қабыршақтың морфологиясына, оптикалық қасиеттеріне, молекулалық құрылымына қасиетіне шунгит толықтырғышының әсері қаншалықты әсер ететіндігін зерттеу. Ол мақсаттарымызға жету үшін *оптикалық микроскоп, жарықтың комбинациялық шашырау спектроскопиясы, атомдық-күштік микроскоп* қолданылды.

Шунгиттің ерекшелігі – шунгитті көміртегінің құрылымымен, жеке қасиеттерінде және силикатты компоненттермен өзара әрекетінде болып табылады. Шунгиттің үлкен температураларға шыдамдылық қасиеті майысатын, жұмсақ қабыршақтар алуға мүмкіндік береді.

Жалпы айтқанда полиимидті қабыршақтың морфологиясына, оптикалық қасиеттеріне, молекулалық құрылымына қасиеті зерттелді. Алынған барлық үлгілерде концентрацияға байланысты өзгерістерді байқауға болады. Концентрация артқан сайын бет соғұрлым тегіс болады. Толықтырғыш қосу қабыршақтың рамандық спектріне қатты әсер етпейді. Рамандық спектрдің бұндай болуы полиимидтің радиацияға

жоғары тұрақтылығымен сипатталады, және де негізгі қасиеттерінің өзгеруі толықтырғыш түрімен қатар концентрациясына да байланысты.

### Зерттелінетін қабыршақтар сипаттамасы

Жұмысымызда полиимидтің бір түрі Каптон қолданылды. Жұмыста қолданыста болған қабыршағымыздың алыну жолына тоқталатын болсақ пиромеллитті диангидридпен 4,4-оксидифениламин арасында орын алатын реакция нәтижесінде пайда болады. Каптон-ның негізгі құрылымы аморфты болып табылады [2].

Полиимидтер негізінде 493 К-ге дейін шыдамдылыққа ие болатын электроизоляциялық материалдардың жаңа тобы пайда болды.

Негізінен каптон жақсы диэлектрик болып табылады. Температураның кең ауқымында тұрақты, мысалы  $-273\text{ }^{\circ}\text{C}$ -дан бастап  $+400\text{ }^{\circ}\text{C}$ -ге дейінгі аралықта [3-4]. Қолданылу аумағына келетін болсақ, көбінесе электроника саласында және скафандрдың сыртқы қабаттарын алуға кең танымал өнім болып саналады. Каптонның жылу өткізгіштігі 0,5 және 5 К болатын төменгі температурада да жоғары болып саналады. Осы төменгі температурада электро-изоляциялық қасиеті жоғары болуына байланысты каптон криогендік техникада, сонымен қатар асқын жоғары вакуумде изолятор ретінде де қолданылады.

### Қондырғылар және тәжірибе әдістемесі

Полиимидті қабықшаның физикалық қасиетіне шунгит толықтырғышының әсерін зерттеу оптикалық микроскопия, жарықтың комбинациялық шашырау спектроскопиясы және АҚМ арқылы морфологиясын зерттеуді қамтыды.

Полиимидті қабықшаның оптикалық қасиеттері Leica DM 6000M оптикалық микроскопы арқылы зерттелді. Негізгі қорытындылары үшінші бөлімде келтірілген.

Рамандық спектроскопия арқылы зерттелген спектралдық зерттеулер Inverted конфигурациясында NT-MDT NTEGRA Spectra спектрометрінде зерттелді. Негізгі сәулелендіру көзі ретінде толқын ұзындығы 630 нм-ге тең лазер қолданылды. Үлгілер оптикалық негіздегі төсенішке орнатылып, бекітілді. Шумды азайту үшін 30 және 100 с және 1 с уақытта қайталануарқылы экспозиция уақытын жинау әдісімен сканерленді. Әрбір ось жанындағы сканерленген нүктелер саны  $600\div 600$ -ге тең.

Қабыршақтардың бетінің морфологиясы атомды-күштік микроскоп (АҚМ) NT – MDT NTEGRA Thermo көмегімен зерттелінді. Алынған үлгілер тұрақты биіктікте әрі зонд-төсемше арасы тұрақты байланыс күшінде контактілі режимде жүргізілді. Зерттеу алдында қабыршақ беттері спиртпен жуылды, басқа химиялық әдістер қолданылмады. Ал шунгит толықтырғышының өлшемдерін оптикалық микроскоп Leica DM 6000 M көмегімен анықтадық [5]. Полиимид үшін қалыпты жағдайда механикалық кернеудің, механикалық салмақтың полиимидке әсерін зерттеу әдісі және полиимидтің физикалық шамасы қарастырылды. Бұл зерттеулерді жүргізуге арналған үлгілер ұзындығы 70 мм, ені 5 мм және белгілі бір қалыңдығы бар тік бұрышты параллелепед.

Жүргізілген зерттеулер барысында полиимид негізіндегі композит материалының морфологиясына, оптикалық қасиеттеріне, молекулалық құрылымына толықтырғыш концентрациясының әсері қарастырылды.

Зерттеулер алдымен таза полиимидті қабыршақпен жүргізіліп, одан соң әр түрлі концентрациялы шунгит толықтырғышы бар полиимид негізіндегі қабыршақтар зерттелінді.

Зонд ретінде тұйықталу радиусы  $\sim 10\text{ нм}$ , қаттылығы 0,1N/m болатын пирамидалық формадағы стандартты кремнийлік кантиливер қолданылды. АҚМ басқа микроскоптармен салыстырғанда (оптикалық, электрондық және т.б.) қатты денелердің бетін мейлінше тереңірек зерттеуге мүмкіндік береді. Бұл қондырғы көмегімен қатты дене бетінің үш өлшемді кескінін алуға, бет рельефімен кеңінен әрі толығырақ танысуға сонымен қатар морфологиялық құрылымын зерттеуге де болады.

Берілген үлгілердің бетін зерттеу екі режимде жүзеге асырылды: топография және фазалық контраст. Топография режимі беттің рельефін тіркейді. Фазалық контраст режимі химиялық құрамы бойынша ерекшеленетін аймақтарды байқауға септігін тигізеді.

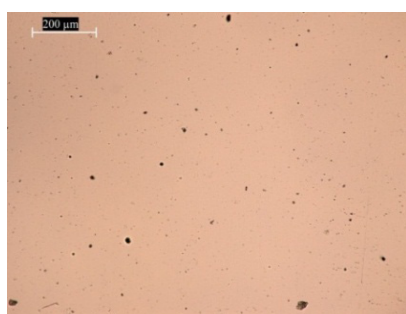
Полиимид үшін қалыпты жағдайда механикалық кернеудің, механикалық салмақтың полиимидке әсерін зерттеу әдісі және полиимидтің физикалық шамасы қарастырылды. Бұл зерттеулерді жүргізуге арналған үлгілер ұзындығы 70 мм (жұмыс жасайтын бөлігі 50 мм), ені 5мм және белгілі бір қалыңдығы бар тік бұрышты параллелепед. Қалыңдығы  $d = 35\text{ мкм}$  полиимидті қабықшаның шунгит толықтырғышымен физикалық қасиеті зерттелді. Шунгит толықтырғыш ретінде композициялық материалдардың механикалық және басқада

қасиеттерін жоғарылатуға көмектеседі. Шунгитті қолдануға түрткі болған негізгі жағдайлар: шунгиттің қолжетімділігі және құрамында 97-99 % көміртегінің болуы [6].

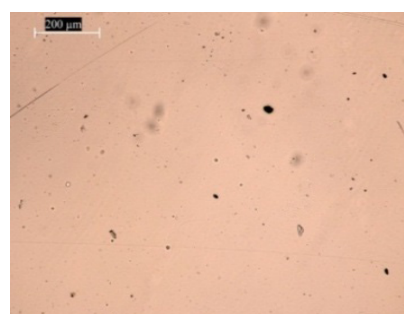
### Зерттеудің негізгі нәтижесі және оны талқылау

Полимерлі композиттердің беріктік және т.б. қасиеттерімен ерекшеленуі толтырғыштың

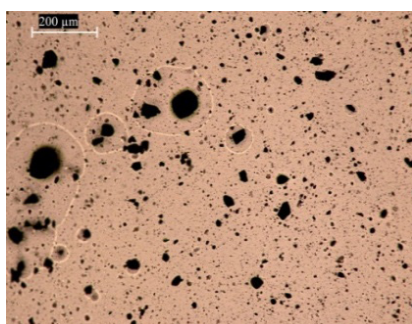
түрі мен қатар оның концентрациясына (шунгит, %) да тәуелді. Полимерлі материалдарға дисперленген толтырғышты салыстырмалы түрде аз мөлшерде (10%-ға дейін) қосу оның беріктігін жоғарылатуға септігін тигізеді. Оптикалық микроскоп LeicaDM 6000 M көмегімен полиимидті матрицадағы шунгит ұнтақтарының түйіршіктерін өлшеу анализі жүргізілді, сонымен қатар ерітіндінің гомогендігі қарастырылды (1-сурет).



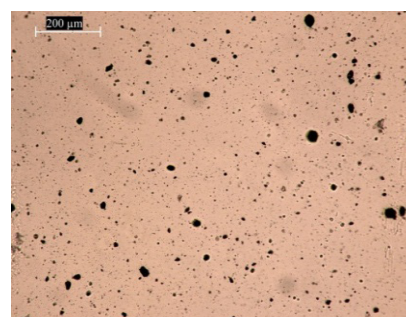
а) шунгит – 0,1%,



ә) шунгит – 0,2%

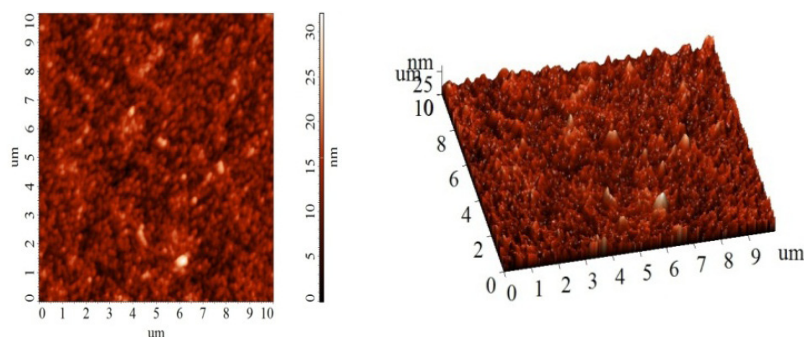


б) шунгит – 0,5%

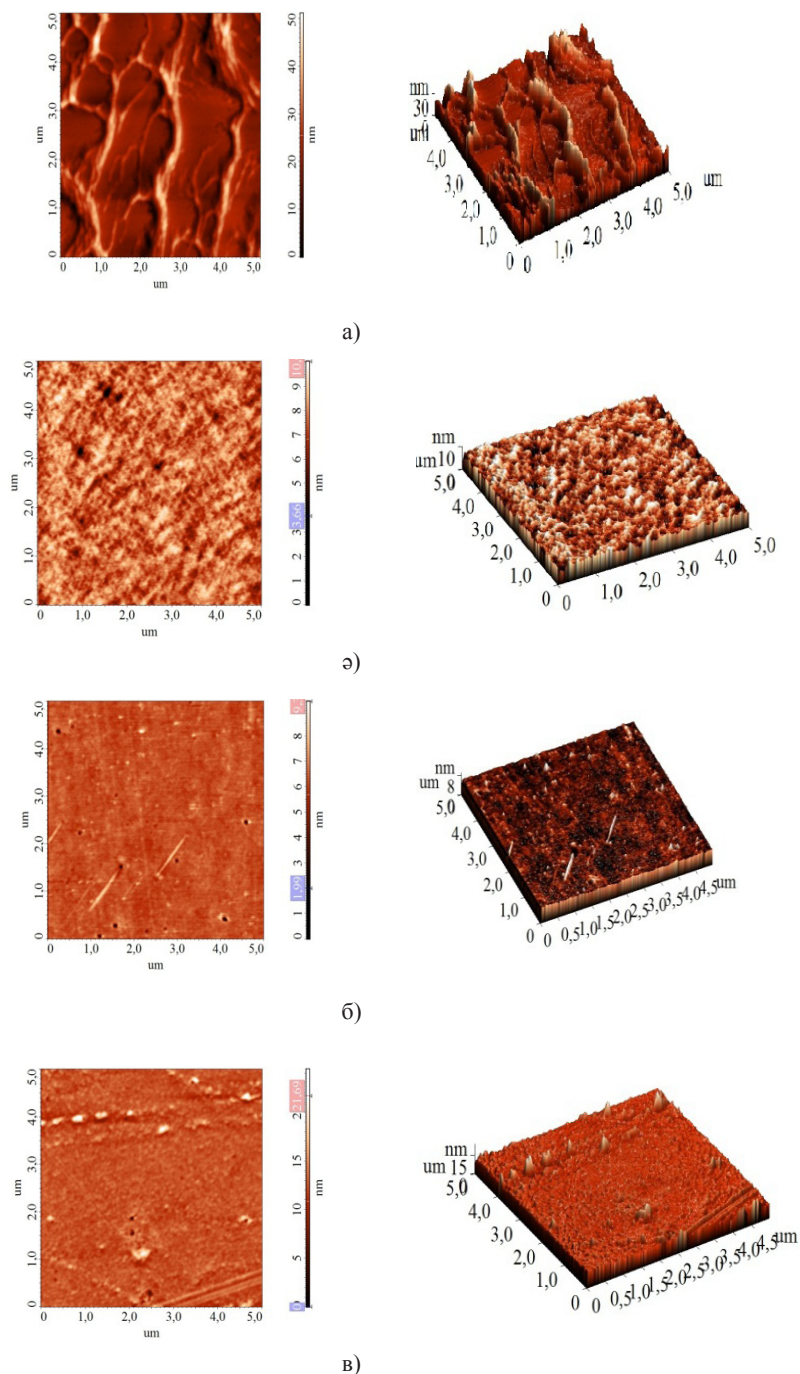


в) шунгит – 1%

**1-сурет** – Полиимидті қабыршақтың шунгит толықтырғышының әртүрлі концентрациясындағы оптикалық микроскопия суреттері



**2-сурет** – Таза полиимид бетінің АҚМ бейнесі



Шунгит толықтырғышының концентрациясы а) 0,1%; ә) 1 %; б) 0,2%; в) 0,5%.

**3-сурет** – Полиимидті қабыршақтың шунгит толықтырғышының әр түрлі концентрациясындағы АКМ суреттері

Суреттерге қарап отырсақ шунгит түйіршіктері концентрация өскен сайын үлкейгенін аңғарамыз. 0,1% мен 1% айырмашылығы анық байқалады. Демек концентрация артқан сайын беттік құрылым бұзылып, біртекті қабыршақ алуға кедергі тудырады. Біртекті, тегіс қабыршақ

алу үшін толықтырғыш концентрациясы аз болғаны тиімді. Және де бұл өзгерістер тек концентрацияға ғана емес, сонымен қатар полиимид қабықша қасиеттеріне дебайланысты.

Қабыршақтарымыздың беттік құрылымын зерттеу үшін атомдық-күштік микроскоп қолда-



нылды. Ең алдымен таза полиимидтің бетінің кескіні алынды, қабыршақ қалыңдығы 0,11 мм (2-сурет). Содан кейін «Полиимид – шунгит» жүйесінің толықтырғыш концентрациялары 0,1%, 0,2%, 0,5%, 1% болатын қабыршақ беттерінің кескіндері алынды (3-сурет).

Төменгі суреттерде шунгит толықтырғышының әртүрлі концентрациясындағы, яғни 0,1%, 1%, 0,2%, 0,5% кезіндегі бейнелері көрсетілген. Әрбір сурет жанында толықтырғыштардың концентрация-сының өзгерісіне байланысты кластерлердің диапазондары көрсетілген. Мысалы таза полиимидтің АКМ бейнесінде негізгі аралық 20-22 нм аралығына сәйкес келеді.

Суреттерден полиимидті қабыршақ бетінде сызаттарға ұқсас сызықтарды көруге болады. Бұл сызықтар қабыршақтың технологиялық формалану процесс кезіндегі шунгит микробөлшектерінің полиимид қышқылдарының аққыштығының байқалуы болуы мүмкін. Бірақ та полиимидті қабыршақ шунгит микробөлшектерінің бетімен түзілсе, онда белгілі бір шарттарда қабыршақтың шунгит микробөлшектерімен берік нүктелік «анкерлік» ілінісуі болуы мүмкін, осыдан кейін оптикалық-механикалық матрицаның бүлінуі орын алады. Электронды-механикалық зерттеулердің нәтижелері бойынша шунгит бөлшектерінің полиимидке ену және орнығу маршруттары бойынша тұжырым жасауға болады.

«Полиимид – шунгит» қабыршақ жүйелерінің беттерінің топографиялық кескіндері бүжірлі рельефпен сипатталады, негізінен морфологиясы кластерлік құрылымға сәйкес келеді.

Көрініп тұрған кластерлер өлшемдері көп жағдайда қабыршақ қалыңдығымен анықталады. Кластерлердің өзі изотермиялық емес дөңгелек формаға ие. Полиимидті қабыршақтардың кластерлі құрылымы жеткілікті түрде анық байқалады, кластерлер жеке-жеке сызат түрде айқын көрінеді.

Берілген қабыршақтардың кейбірінде кластерлер тізбегін құрайтын таяқша күйдегі туынды байқалады [7]. Бұл құрылымдар ұзындығы бірнеше жүз нанометрге дейін жетеді және де өзара тең әрі реттелген бағытта орналасады.

Толықтырғыш концентрациясы 1,0 сал. % болатын қабыршақтың АКМ бейнесінен кластерлердің реттелген, бағытталған көрінісін байқауға болады және де аздаған жерлерінде кластерлердің бірігуін жота күйінде көрсетілгенін аңғарамыз.

Толықтырғыш концентрациясы 0,5 сал. % болатын қабыршақтың морфологиялық құрылы-

мының АКМ бейнесі басқаларынан қарағанда салыстырмалы түрде тегіс. Тек жоғары үлкейту кезінде ғана болмаса, блокты құрылымды анық байқау өте қиын. Сонымен қатар кластерлердің бір-бірімен біріккенін ойыс немесе жота түрінде байқауға болады.

Толықтырғыш концентрациясы 0,1 сал. % болатын қабыршақтың АКМ бейнесінен кластерлердің белгілі бір ретпен орналасуын бақылау өте қиын, өйткені әр жерде шашыраңқы орналасқан, бетінде жоталарға ұқсас құрылымды аңғаруға болады. Кейбір жерлерінде кластерлердің бір-бірімен біріккен жерлері ойыс жіпше күйінде көрінеді.

Толықтырғыш концентрациясы 0,2 сал. % болатын қабыршақтың АКМ бейнесінен кластерлердің тегіс бейнесін көре аламыз, толықтырғыш қара дақ түрінде әр жерде шашыраңқы орналасқан. Басқа концентрациялармен салыстырғанда беттік кедір-бұдырлылық, жотаға ұқсас құрылымдар байқалмайды. Тәжірибе барысында кластерлер өлшемдері қабыршақтар қалыңдығына, концентрацияға тікелей тәуелді екенін аңғардық.

Жарықтың комбинациялық шашырау спектроскопиясы – заттың құрамы мен құрылымына химиялық анализ жасауға арналған тиімді әдістердің бірі болып табылады [36]. Демек заттың молекулалық құрылымын зерттеуге арналған әдіс. Рамандық шашырау жарықтың толқын ұзындығының өзгеруімен жүреді, яғни шашыраған молекуланың тербелмелі бөлшектерінің жарықпен әсерлесуі нәтижесінде түскен жарықтың толқын ұзындығы өзгеріске ұшырайды. 4 суретте құрамында әртүрлі концентрациядағы шунгит толықтырғышы бар полиимидті қабықшаның Рамандық спектрінің суреті көрсетілген [8-9]. Суреттен айтарлықтай өзгеріс көрінбейді, тек байланыстарында аздаған өзгерістерді аңғаруға болады.

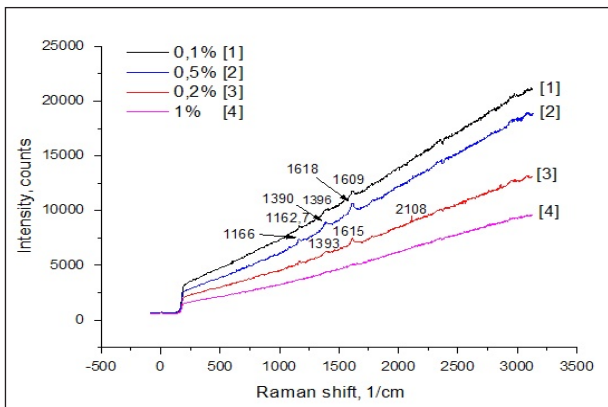
Демек толықтырғыш қосу қабықшаның Рамандық спектріне қатты әсер етпейді. Рамандық спектрдің бұндай болуы полиимидтің радиацияға жоғары тұрақтылығымен сипатталады.

Рамандық спектрде шунгиттің концентрациясы 0,1% кезінде өзгерістерді байқауға болады. Таза полиимидті қабықшада С-О-С байланысы  $1118 \text{ см}^{-1}$ -ге сәйкес келсе, ал толықтырғыш қосылғаннан кейін ол аралығымыз  $1162,7$ -ге сәйкес болды. Демек бұл жердегі тербеліс түрі симметриялы  $\text{SO}_2$  байланыс болып табылады. Келесі пик  $1396 \text{ см}^{-1}$  сәйкес келеді. Бұл жердегі байланыс С- ( $\text{NO}_2$ ) симметриялы байланыста. Осылайша салыстырып қарайтын

болсақ негізгі интенсивтіліктің спектралды өзгерістері:  $1609\text{-}2108\text{ см}^{-1}$  ( $\text{C}=\text{C}$ )~20%, Шунгит концентрациясының 1 сал.% дейін өсуі

Рамандық спектрдің айтарлықтай өзгерісін тудырмайды.

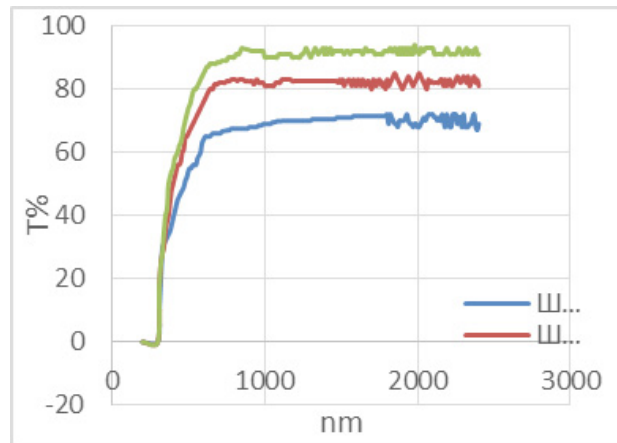
Көлемдік қабаттың шекаралық қабаттан айырмашылығы болуына байланысты 0,1% және 1% аумағында қабықшаның қасиеттерінің өзгеруі тек қана толықтырғыштың концентрациясының өсуімен ғана емес, сонымен қатар шунгитпен шекаралық қабатта шунгит бөлшектерімен қатар орналасқан полиимидтің қабықшаның өзгерісіне де байланысты. Бұндай процесс материалдың бірден өсіп және беріктіліктің бірден төмендеуі, сонымен қатар пластикалық қасиетінің төмендеуіне әкеледі [37].



4-сурет – Құрамында шунгит толықтырғышы бар полиимидті қабықшаның Раман спектрінің суреті

Жұмысымызда құрылымдық-активті толықтырғыштардың әсерлесу радиусы 100 – 200 мкм болатындығы көрсетілген. Шекаралық қабаттың құрылымы беттен толықтырғышты жою мөлшеріне байланысты өзгеріске ұшырайды. Бұл шекаралық қабатты әртүрлі өтпелі қабаттардың жиынтығы ретінде қарауға мүмкіндік береді. 5 суретте әртүрлі концентрациялы шунгит толықтырғышы енгізілген полимерлі композиттік материалдардың жарықты өткізу коэффициенттерінің өзгерісін салыстыру графигі көрсетілген.

Шунгит толықтырғыштан тұратын ПКМ үлгілердің оптикалық қасиеттері толықтырғыш концентрациясына тікелей тәуелді. Жарық өткізу коэффициентінің  $\lambda=200\text{-}500\text{ нм}$  мәнінде өте тез көтерілуі байқалады. Бұл құбылыстар қабыршақтың оптикалық центрінің әсерінен болатын ішкі қайта құрылуға байланысты.



5-сурет – Әртүрлі концентрациялы шунгит толықтырғышы енгізілген полимерлі композиттік материалдардың жарықты өткізу коэффициенттерінің өзгерісін салыстыру графигі

Полимерлі композит материалға толтырғышты 0,2 салмақ % концентрацияда ендіру композитті материалдың жарық өткізу коэффициентінің көп өзгерісіне алып келмейді, жарық өткізу коэффициентінің мәнін 8-10% төмендеді. 700-770 нм толқын ұзындығы аралығында төбешік байқалады.

Шунгит толықтырғыштан тұратын ПКМ үлгілердің оптикалық қасиеттері толықтырғыш концентрациясына тікелей тәуелді [10]. Жарық өткізу коэффициентінің  $\lambda=200\text{-}500\text{ нм}$  мәнінде өте тез көтерілуі байқалады. Бұл құбылыстар қабыршақтың оптикалық центрінің әсерінен болатын ішкі қайта құрылуға байланысты.

Полимерлі композит материалға толтырғышты 0,5 салмақ % концентрацияда ендіру композитті материалдың жарық өткізу коэффициентінің көп өзгерісіне алып келмейді, жарық өткізу коэффициентінің мәнін 15-18% төмендеді. 700-770 нм толқын ұзындығы аралығында төбешік байқалады.

Шунгит толықтырғыштан тұратын ПКМ үлгілердің оптикалық қасиеттері толықтырғыш концентрациясына тікелей тәуелді. Жарық өткізу коэффициентінің  $\lambda=600\text{-}800\text{ нм}$  мәнінде өте тез көтерілуі байқалады. Бұл құбылыстар қабыршақтың оптикалық центрінің әсерінен болатын ішкі қайта құрылуға байланысты [11-12].

Полимерлі композит материалға толтырғышты 1,0 салмақ % концентрацияда ендіру жарық өткізу коэффициентінің мәнін 25-30% төмендеді. Бұл ПКМ матрицасының қайта құрылуымен байланысты құбылыстардың болатынына негізделеді.

Графикте байқағанымыздай ПКМ-дың матрицасына толықтырғыштар енгізу олардың оптикалық қасиеттеріне өз әсерін тигізеді. Бұл жұмыста шунгит толықтырғышын полиимид матрицасына енгізген кездегі жарықты өткізу коэффициентінің өзгерісі зерттелді. Толықтырғыштың әртүрлі концентрацияда енгізілді. Зерттеулер құрамында 0,2 салмақ %, 0,5 салмақ %, 1,0 салмақ % нанодисперсті шунгит толықтырғышы бар қабыршақтарға жүргізілді.

Толықтырғыш концентрациясы 0,2 салмақ % болатын композиттік қабыршақтың жарық өткізу коэффициентінің аса өзгерісі байқалмайды.

Ал толықтырғыш концентрациясы 0,5 салмақ % болатын композиттің жарық өткізу қасиеті әдеттегідей ультракүлгін диапазонда артып, көрінетін аумақта төбешік тәрізді күрт өсуі байқалды. 700-770 нм толқын ұзындығы аралығында төбешік байқалады. 800 нм-ден жоғары бірқалыпты өтуі тіркелді. Бұл процесс өз кезегінде ПКМ матрицасының ішкі қайта құрылымдануына байланысты болуы мүмкін.

Толықтырғыш концентрациясы 1,0 салмақ % болатын композиттік қабыршақтардың жарықты өткізу қасиеті ультракүлгін диапазонда ( $\lambda=290-500$  нм) күрт жоғарылауы байқалып, көрінетін диапазоннан бастап ( $\lambda=600-800$  нм) біршама реттеледі. Жарық өткізу коэффициенті шамамен 25-30%-ға төмендейді.

### Жұмыстың негізгі нәтижелері

Полиимид қабыршақтарының және «Полиимид – шунгит толықтырғыш» жүйесіне талдау жүргізу арқылы мынадай қорытынды жасалынды:

1) Шунгит толықтырғыштан тұратын полимерлі композитті материал үлгілерінің

физикалық қасиеттері полиимид қабыршақтың концентрациясына, қабыршақ қалыңдығына тікелей тәуелді. Оптикалық микроскоппен зерттеу барысында концентрация артқан сайын болған өзгерістерді талдай отырып аздаған мөлшерде дисперленген толықтырғыштың енгізілуі полимерлі матрицаның физика-химиялық өзара байланыстарын өзгертетінін аңғарамыз. Толықтырғышты салыстырмалы түрде аз мөлшерде қосу оның беріктігін жоғарылатуға септігін тигізеді. Егер де толықтырғыштың концентрациясын одан да өсіретін болсақ, онда ол полиимидті қабыршақтардың механикалық қасиеттерінің төмендеуіне әкеліп соғады.

2) Полиимидке қабыршақтың атомдық-күштік микроскоппен алынған кескіндері бойынша мынадай қорытындыға келуге болады: кластерлер өлшемдері қабыршақтар қалыңдығына, концентрацияға тікелей тәуелді. Шунгит толықтырғышын 0,5 салмақ % және 0,2 салмақ % концентрацияда ендірген кезде бет тегістілігі байқалады. 0,1 салмақ % енгізген кезде бет тегістілігін аңғару қиын, ал 1 салмақ % кластерлердің реттелген, бағытталған көрінісін байқауға болады. Демек концентрация неғұрлым аз болса, бет соғұрлым тегіс болады.

3) Рамандық спектрлерді зерттеуде беріктіктің бірден артуы шекарадағы полиимидтің дисперсті толықтырғышпен берік өзара байланысымен түсіндіріледі. Әр түрлі концентрация кезінде беріктіктің бірден өсуі шекаралық қабаттағы полимердің дисперсті толықтырғыш бетімен күшті байланыста болатынын дәлелдейді. Толықтырғыш қосу қабыршаның рамандық спектріне қатты әсер етпейді. Рамандық спектрдің бұндай болуы полиимидтің радиацияға жоғары тұрақтылығымен сипатталады.

### Әдебиеттер

- 1 Крыжановский В.К., Бурлов В.В. и др. Технические свойства полимерных материалов. – СПб.: Профессия, 2005 – 248 с.
- 2 Kroto H.W., Heath J.R., O'Brien S.C. C60: Buckminsterfullerene // Nature. – 1985. – V. 318. – P.162-168.
- 3 Канцельсон М.Ю., Балаев Г.А. Полимерные материалы: Справочник. – Л.: Химия, 1982. – 317 с.
- 4 Гуляев Г.М. Структура и свойства полимерных волокнистых композиционных материалов – М.: Химия. 1981. – 210 с.
- 5 Полимерные композиционные материалы: структура, свойства, технология: учеб.пособие/ М.Л Кербер, В.М. Виноградов, Г.С. Головкин и др.; под ред. А.А.Берлина. – СПб.: Профессия, 2008 – 560 с.\
- 6 Игнатов С.Г. и др. Применение АСМ для специфической визуализации микроорганизмов // Мат. VI Всерос. науч.-практ. конф. с междунар. участием «Молекулярная диагностика – 2007». – 2007. – Т. 1. – С. 81-82.
- 7 Maluchenko N.V., Agapov I.I., Tonevitsky A.G. et al. Detection of immune complexes using atomic force microscopy // Biofizika. – 2004. – V. 49. – № 6. – P. 1008–1014.
- 8 Сагалаев Г.В. В кн. «Наполнители полимерных материалов: материалы семинаров», Москва, о-во «Знание» РСФСР, 1969. – С.18-29.

- 9 Зондовая НаноЛаборатория ИНТЕГРА Спектра (конфигурация Inverted) / Руководство пользователя. – Москва, Зеленоград. – 2007. – 73 с.
- 10 Karpinosa K. Handbook of composites, ed. by G. Lubin, N.Y., 1982.
- 11 Джуманов С., Ашуров М.Х., Курбанов А.М., Худжакулов Д.Ч. – В кн.: Тезисы докладов Международной конференции радиационному материаловедению. Харьков.- 1990.-т.3- с.75.

#### References

- 1 V.K. Kryzhanovskiy, V.V. Burlov i dr. Tekhnicheskiye svoystva polimernykh materialov. – SPb.: Professiya, 2005 – 248 s. (in russ).
- 2 H.W. Kroto, J.R. Heath, S.C. O'Brien, Nature, 318, 162-168, (1985).
- 3 M.Yu. Kantsel'son, G.A. Balayev Polimernyye materialy: Spravochnik. – L.: Khimiya, 1982. – 317 s. (in russ).
- 4 G.M. Gunyayev Stroyeniye i svoystva polimernykh volknistykh kompozitsionnykh materialov – M.: Khimiya. 1981.- 210 s. (in russ).
- 5 Polimernyye kompozitsionnyye materialy: struktura, svoystva, tekhnologiya: ucheb.posobiye/ M.L Kerber, V.M. Vinogradov, G.S. Golovkin i dr.; pod red. A.A. Berlina. – SPb.: Professiya, 2008 – 560 s. (in russ).
- 6 Ignatov S.G. i dr., Mat. VI Vseros. nauch.-prakt. konf. s mezhdunar. uchastiyem «Molekulyarnaya diagnostika – 2007», 1, 81-82, (2007). (in russ).
- 7 N.V. Maluchenko, I.I. Agapov, A.G. Tonevitsky et al., Biofizika, 49(6), 1008-1014, (2004).
- 8 G.V. Sagalayev. V kn. «Napolniteli polimernykh materialov: materialy seminarov», Moskva, o-vo «Znaniye» RSFSR, 1969. – С.18-29. (in russ).
- 9 Zondovaya NanoLaboratoriya INTEGRA Spektra (konfiguratsiya Inverted) / Rukovodstvo pol'zovatelya. – Moskva, Zelenograd. – 2007. – 73 s. (in russ).
- 10 Karpinosa K. Handbook of composites, ed. by G. Lubin, N.Y., 1982.
- 11 Dzhumanov S., Ashurov M.X., Kurbanov A.M., Khudzhakulov D.CH. – V kn.: Tezisy dokladov Mezhdunarodnoy konferentsii radiatsionnomu materialovedeniyu. Khar'kov.- 1990.-Т.3- s.75.



Тлеукунов Е.О.,  
Плотников С.В.,  
Погребняк А.Д.,  
Ердыбаева Н.К.,  
Манапбаева А.Б.

**Микроструктура, элементный и фазовый состав и физико-механические свойства нанокompозитных (Ti-Zr-Hf-V-Nb-Ta)N покрытий до и после имплантации высокими дозами ионов азота**

Tleukenov Y.O.,  
Plotnikov S.V.,  
Pogrebnyak A.D.,  
Erdybaeva N.K.,  
Manapbayeva A.B.

**Microstructure, elemental and phase composition and physical-mechanical properties of nanocomposite (Ti-Zr-Hf-V-Nb-Ta)N coatings before and after implantation of high doses of nitrogen ions**

Тлеукунов Е.О.,  
Плотников С.В.,  
Погребняк А.Д.,  
Ердыбаева Н.К.,  
Манапбаева А.Б.

**Нанокompозициялық (Ti-Zr-Hf-V-Nb-Ta)N жабынның азоттың үлкен дозасымен импланттануға дейін және кейінгі микроқұрылымы, элементтік және фазалық құрылымы және физико-механикалық қасиеті**

Изучены структура и свойства наноструктурных многокомпонентных покрытий (TiHfZrNbVTa)N имплантированных очень высокими  $10^{18}$  см<sup>-2</sup> дозами ионов N<sup>+</sup>. В результате имплантации ионов в поверхностном слое наноструктурного покрытия формируется многослойная структура состоящая из аморфного, нанокристаллического (диспергированного) и наноструктурного с исходными размерами нанозерен. В глубине покрытия формируются 2 фазы: ГЦК и ГПУ с небольшим объёмным содержанием. Концентрация азота вблизи поверхности достигает 90 at.% и затем уменьшается с глубиной. В исходном состоянии после осаждения нанотвёрдость покрытия, в зависимости от условий осаждения имеет значения от 27 до 34 GPa. В результате имплантации, величина твердости уменьшается примерно на глубину проективного пробега ионов до 12 GPa, а дальше увеличивается с глубиной до 23 GPa. Были использованы методы анализа: растровая электронная микроскопия (SEM) с микроанализом (EDS), дифракция рентгеновских лучей (XRD), наноидентификация, тесты на износ.

**Ключевые слова:** имплантация, микроструктура, нанотвёрдость, осаждение, микроанализ

The structure and properties of multicomponent nanostructured coatings (TiHfZrNbVTa) N implanted with very high  $10^{18}$  cm<sup>-2</sup> doses of ions N<sup>+</sup> were investigated. Multilayered structure consisting of an amorphous nanocrystalline (dispersed) and nanostructured with original size of the nanograins formed as a result of the implantation of ions in the surface layer of the nanostructured coating. 2 phases formed in the depth of the coating: FCC and HCP with a small volume fraction. Nitrogen concentration near the surface reaches up to 90 at.% and then decreases with depth. In the initial state after deposition the nanohardness of the coating, depending on the deposition conditions, ranges from 27 to 39 GPa. As a result of the implantation, the value of the hardness decreases approximately to the depth of the ions projected range up to 12 GPa, and further increases with the depth up to 23 GPa. It were used such analysis techniques as: scanning electron microscopy (SEM) with microanalysis (EDS), X-ray diffraction (XRD), nanoindentation, tests for wear.

**Key words:** implantation, microstructure, nanohardness, deposition, microanalysis

Өте жоғары  $10^{18}$  см<sup>-2</sup> азот N<sup>+</sup> ион дозаларымен имплантталған (TiHfZrNbVTa)N наноқұрылымды көп компонентті жабынның құрылымы және қасиеттері зерттелген. Наноқұрылымды жабынның қабатының бетінде иондардың импланттану нәтижесінде аморфты, нанокристаллды (дисперленген) және бастапқы өлшемі бар нанотүйіршіктің наноқұрылымды көп қабатты құрылым қалыптасады. Шағын көлемді 2 ГЦК және ГПУ фазалары жабынның терең жағында қалыптасады. Азоттың концентрациясы беттік жағында 90 at.%-ке дейін жетеді және жабынның ішіне тереңдеген сайын азаяды. Тұндыру шартына байланысты бастапқы кездегі тұндырудан кейінгі жабынның наноқаттылығы 27-ден 34 GPa-ға дейін өлшемге ие болған. Қаттылық шамасы иондардың проекттік тереңдігі 12 GPa дейін имплантация нәтижесінде азаяды, содан кейін 23 GPa тереңдікте өседі. Қолданылған талдау тәсілдері: (EDS) микроталдауы бар растрлық электрондық микроскоп (SEM), рентген сәулелерінің дифракциясы (XRD), наноидентірілену, тозуға сынақ.

**Түйін сөздер:** жоғарыэнтропиялық қоспа, нанокompозиттік құрылым, нанокристаллиттер, шөгун, микродифракция

**МИКРОСТРУКТУРА,  
ЭЛЕМЕНТНЫЙ И  
ФАЗОВЫЙ СОСТАВ И  
ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕ-  
СКИЕ СВОЙСТВА  
НАНОКОМПОЗИТНЫХ  
(TI-ZR-NF-V-NB-TA)N  
ПОКРЫТИЙ ДО И  
ПОСЛЕ ИМПЛАНТИРО-  
ВАННЯ ВЫСОКИМИ  
ДОЗАМИ ИОНОВ АЗОТА**

**Введение**

Ионная имплантация является одним из основных методов модификации поверхности твердых тел с целью улучшения физико – механических свойств: трения, износа, коррозии, адгезии, усталостной прочности и т.д. [1-5]. Ионная имплантация (ИИ) широко используется для легирования полупроводников (диэлектриков) в микро- и нанoeлектронике, медицине, авиации, химической и авиационной промышленности [3-7]. Основным достоинством этого метода является сохранение размеров образцов, локальность (небольшой пробег), высокая воспроизводимость, нет проблем с адгезией и пр. [5-11]. Для улучшения свойств металлов, сплавов, керамики (или изделий из них), необходимы дозы имплантации ионов  $5 \times 10^{16} - 8 \times 10^{17} \text{ см}^{-2}$ . Однако, в отдельных случаях, необходима очень высокая доза имплантации  $(1-2) \times 10^{18} \text{ см}^{-2}$ , что соответствует количеству атомов  $(1-5)10^{23} \text{ см}^{-3}$ , в решетке подложки в области имплантации (т.е. на глубину пробега ионов). С другой стороны, в последнее время, большой интерес проявляется к исследованию нового класса материалов (высокоэнтропийных сплавов – ВЭС) с числом атомов не меньше 5 с их атомным содержанием в сплаве от 5 до 35 at.%, в первую очередь, из-за их блестящих характеристик [6-11]. Формирование из этих сплавов покрытий из нитридов или карбидов позволяет значительно расширить спектр этих свойств и даже улучшить их. На сегодняшний день достаточно хорошо изучены свойства нитридов, состоящих в основном из 5,6,7 элементов, но в отдельных случаях, могут иметь в своем составе разнородных атомов до 19 [11].

Из-за того, что нитридные покрытия из ВЭСов обладают более высокими свойствами и характеристиками в процессе испытаний, к ним в мире уделяют также большое внимание. Однако, в связи с тем, что при определенных условиях работы таких покрытий необходима высокая стойкость к окислению и стойкость к радиации (облучению) этих нитридов из ВЭСов, стоит задача проверить эти системы (нитридные) покрытия на стойкость к облучению. За последние 1,5-2 года, в литературе, было опубликовано всего несколько работ о использовании ионной имплантации для улучшения твердости, индекса пластичности,

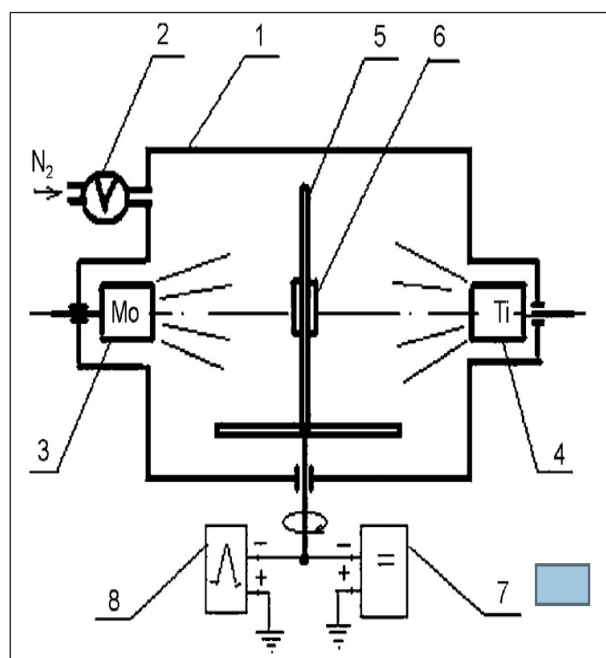
стойкости к коррозии при внедрении в покрытие ионов  $\text{Cu}^-$ ,  $\text{Au}^-$ ,  $\text{N}^+$  с облучаемой дозой от  $8 \times 10^{16}$  до  $4 \times 10^{17} \text{ см}^{-2}$  [11-14]. Было обнаружено улучшение свойств, например твердости, в интервале  $(1-2) \times 10^{17} \text{ см}^{-2}$  доз имплантации [14]. Таким образом из анализа опубликованных работ по исследованию характеристик и свойств нитридных многоэлементных покрытий видно, что интервалы доз имплантации очень небольшие, особенно для улучшения физико-механических характеристик. Облучение ионами  $\text{N}^+$  дозой до  $10^{18} \text{ см}^{-2}$ , когда доза внедренных ионов может составить атомную концентрацию вещества твердого тела ( $1 \times 10^{23} - 5 \times 10^{23} \text{ см}^{-3}$ ) не изучены еще совсем. Также видно из представленного анализа работ, что данное направление работ достаточно актуально на сегодняшний день. Поэтому в этой работе мы ставили задачу: исследовать микроструктуру, физико-механические свойства наноструктурных многоэлементных покрытий, облученных очень высокими дозами ионов  $\text{N}^+$  до  $10^{18} \text{ см}^{-2}$ .

### Экспериментальная часть

Высокоэнтропийный сплав наносился на подложку из стали марки 12X18H9T в качестве подложки с размерами  $15 \times 15 \times 2.5 \text{ мм}$  и с шероховатостью в исходной поверхности  $Ra \approx 0,09 \text{ мкм}$ . Поверхность подложки обрабатывали с помощью тлеющего разряда, чтобы очистить и активировать его перед нанесением. Для нанесения покрытий было использовано вакуумно-дуговое устройство Булат-6 с шестью испарителями (Ti, Hf, Zr, Nb, V, Ta), что позволяет нанесение наноструктурированных покрытий в импульсном режиме с переменной амплитудой импульса и частотой импульса.

На рис. 1 показана схема системы осаждения. Вакуумная камера (1) (базовое давление камеры составляло  $0,001 \text{ Па}$ ) была оснащена системой автоматического регулирования давления азота (2) и шестью испарителями, состоящих из Ti, Hf, Zr, Nb, V, Ta (чистота металлической мишени было  $99,8\%$ ). Держатель подложки (5) был установлен на вращающейся пластине из нержавеющей стали ( $300 \times 300 \text{ мм}$ ), на котором были размещены подложки (6). БУЛАТ-6 был также оборудован источником напряжения постоянного тока (7), значение которого может изменяться от 5 до  $1000 \text{ В}$ , а генератор импульсного напряжения (8) с возможностью регулировки амплитуды импульса напряжения от  $0,5-2 \text{ кВ}$  и частотой повторения  $5-7 \text{ кГц}$ . Процесс очистки подложки проводят с использованием

ионов молибдена в течение 3-5 мин, при применении потенциал на  $1 \text{ кВ}$  подложки. Кроме того, азот впрыскивают в камеру, и нитриды Ti, Hf, Zr, Nb, V, Ta осаждались на противоположных сторонах подложки. Когда осаждение первых слоев было закончено, процесс осаждения приостанавливался и подложки переворачивались на угол  $180^\circ$ , затем осаждение снова начиналось. Таким образом, средняя скорость осаждения составляет  $1-2 \text{ нм/с}$ . Ток дуги составлял  $95-100 \text{ А}$  во время осаждения, давление азота в камере составляло  $0,5 \text{ Па}$ , расстояние между испарителем и подложкой было  $250 \text{ мм}$ , а температура подложки была равна  $250-350^\circ \text{ С}$ .



**Рисунок 1** – Схематическое изображение системы осаждения «Булат-6» (1 – вакуумная камера; 2-автоматическая система контроля давления азота; 3 – молибденовый испаритель; 4 – титановый испаритель; 5 – держатель подложки; 6 – подложка; 7 – DC источник напряжения; 8 – высоковольтный генератор импульсов)

Во время нанесения покрытий на подложку, импульсный потенциал составлял  $-40 \text{ В}$  (с длительностью  $10 \text{ мкс}$  и частотой повторения  $7 \text{ кГц}$ ). Энергия пучка ионов  $\text{He}^+$  была зафиксирована на уровне  $1,5 \text{ МэВ}$ , а другие экспериментальные параметры, относящиеся к нормальному падению ионов имели угол рассеяния  $\theta = 170^\circ$ , ионы  $\text{He}$  с дозой  $5 \text{ мкС}$  и с разрешением детектора энергии  $16 \text{ кэВ}$  [12].



Катоды из высокоэнтропийного сплава системы Ti-Zr-Hf-V-Nb-Ta были получены путем вакуумно-дуговой плавки в атмосфере аргона с высокой чистотой, используя неплавящийся электрод в водоохлаждаемом медном сосуде. Нитридные покрытия наносились вакуумно-дуговым испарением катода в устройстве Булат-3Т-М [13]. Параметры осаждения и элементный состав катода и нитридных покрытий представлены в таблице 1, где  $U_b$  – напряже-

ние смещения, приложенного к подложке,  $P_N$  – давление азота в камере осаждения. Импульсный режим осаждения был выбран для того, чтобы увеличить энергию ионно-плазменного потока, улучшить адгезию покрытий, нанесенных на подложку, а также для получения более дисперсной структуры покрытий. Стальные диски (A 570 Grade 36) с диаметром 45 мм и толщиной 4 мм, были использованы в качестве подложки.

**Таблица 1** – Параметры осаждения и концентрации элементов в (TiHfZrVNbTa) N покрытий

Номер серий	$U_b$ , V	$P_N$ , Torr	Концентрация, at. %						
			N	Ti	Zr	Hf	V	Nb	Ta
1	150	$3 \times 10^{-3}$	54	7.03	8.52	11.30	5.02	9.93	4.20
2	70	$4 \times 10^{-3}$	55	10.76	7.71	8.06	5.85	8.38	4.24
3	150	$3 \times 10^{-4}$	46	9.04	9.8	12.81	5.60	12.13	4.62
4	150	$3 \times 10^{-3}$	45.7	9.05	9.85	12.91	5.65	12.18	4.67
5	150	$7 \times 10^{-4}$	53	9.72	8.44	9.42	6.54	8.1	4.78
6	150	$7 \times 10^{-3}$	54	9.38	8.2	9.10	6.54	8.1	4.78
7*	150	$7 \times 10^{-4}$	44	9	11	12	7	12	5
8**	150	$7 \times 10^{-4}$	46	10	11	9	10	10	4
Катод	–	–	–	21.52	18.77	15.5	10.2	18.2	15.81

\* – концентрация была определена с использованием POP (перед имплантацией)

\*\* – концентрация после ионной имплантации

Ионная имплантация ионами  $N^+$  с энергией 60 кэВ было сделано на полупромышленном имплантере в вакууме, где плотность тока не превышала  $0,1 \text{ mA/cm}^2$ .

Для исследования структуры и субструктуры образцов с покрытиями, а так же измерения фазового состава покрытий были использованы в экспериментах рентгеновские дифрактометры ДРОН – 4 в излучении  $CuK\alpha$  и RINT-2500 V с использованием позиционно-чувствительного пропорционального счетчика (PSPC/MDGT). Рабочие значения напряжений и тока рентгеновского дифрактометра равны 40 kV и 300mA соответственно. Съемку спектров XRD проводили под углами  $2^\circ$ ,  $3^\circ$ ,  $10^\circ$ , и  $30^\circ$  для образцов в исходном состоянии (после осаждения покрытия). Исследование фазово-структурного состояния проводилось на дифрактометре ДРОН-4 в излучении  $CuK\alpha$  (длина волны  $\lambda = 0.154178 \text{ nm}$ ) с использованием во вторичном пучке графитового монохроматора. Съемка дифракционного спектра для фазового анализа проводилась по схеме  $\theta$ - $2\theta$ -сканирования с фокусировкой по

Брэггу–Брентано в интервале углов  $25 - 90^\circ$ . Исследования проводились в поточечном режиме с шагом сканирования  $\Delta(2\theta) = 0.02 - 0.2^\circ$  и длительностью накопления импульсов в каждой точке  $10 - 100 \text{ s}$  в зависимости от ширины и интенсивности дифракционных максимумов. Для анализа элементного состава использовались два метода: микроанализ с помощью энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии (EDX) на растровом электронном микроскопе JEOL-7000F (Japan), а также SIMS-анализ (SIMS – масс-спектрометрия вторичных ионов) с помощью времяпролетного спектрометра (ULVAC-PHI TRIFTV nanoTOF, Physical Electronics, Inc., Japan). Для исследования распределения элементов вблизи поверхностного слоя применялся метод PIXE (PIXE – метод индуцируемого частицами характеристического рентгеновского излучения) с использованием микропучка протонов  $1.5 \text{ MeV}$  с диаметром пучка около  $0.5 \mu\text{m}$ . Дополнительно использовался растровый электронный микроскоп с энергодисперсионным спектрометром JSM-6010 LA (JEOL, Japan).

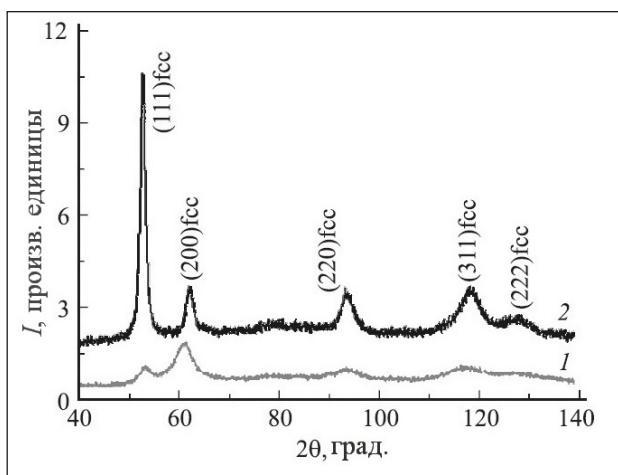
Измерения проводились при низком вакууме и рабочем ускоряющем напряжении 20 kV.

Анализ структуры и фазового состава проводился на электронном микроскопе JEOL JEM-2100F с энергией электронов до 200 keV, для чего были подготовлены фольги или ламельки с помощью ионного пучка.

Измерения микротвердости и модуля упругости проводилось методом динамического вдавливания пирамидки Берковича (Triboindenter TI-950 (HYSITRON, Inc.)), при этом получалось трехмерное изображение отпечатка, исходя из которого можно оценить глубину вдавливания и определить значение приведенного модуля упругости. Измерения проводились при изменении нагрузки индентора от 500 до 10 000  $\mu\text{N}$  [15-18].

### Результаты и обсуждение

Из таблицы 1 видно, что повышение давления от  $3 \times 10^{-4}$  до  $3 \times 10^{-3}$  Торг приводит к повышению концентрации азота в составе покрытия. При этом, содержание металлических элементов, таких как Ti, Nb, V, уменьшается. Изменение давления в камере, в процессе осаждения, приводит также к изменению концентрации элементов в покрытии, которые отличны от характерных для состава литого катода [табл.1].



**Рисунок 2** – Участки дифракционных спектров покрытий системы (TiZrHfVNbTa)N, полученных при разных  $P_N = 3 \cdot 10^{-4}$  (1) и  $3 \cdot 10^{-3}$  (2) Торг

На рисунке 2 представлены XRD-спектры (XRD – рентгенодифракционный анализ) нитридных покрытий, полученных из высокоэн-

тропийных сплавов при различных давлениях азота в процессе осаждения. Из результатов XRD-анализа видно, что в качестве основной кристаллической фазы формируется фаза с ГЦК-решеткой, что характерно для структуры нитрида многоэлементного сплава. Средний размер кристаллитов ГЦК-фазы в покрытиях при низком давлении  $3 \times 10^{-4}$  Торг, определенный по формуле Шеррера, составляет около 8 nm. При этом формируется преимущественная ориентация роста кристаллитов с плоскостью (200), параллельной поверхности (при этом ось текстуры [100] перпендикулярна плоскости поверхности). Согласно исследованиям твердости покрытий по Виккерсу, в этом случае наблюдается высокая твердость  $51 \pm 0.7$  GPa. Спектр 2 на рис. 37, отвечающий покрытию, полученному при сравнительно высоком давлении  $3 \times 10^{-3}$  Торг, имеет принципиальное отличие: появляется преимущественная ориентация плоскости (111), параллельной поверхности роста, что проявляется в виде существенного увеличения относительной интенсивности пиков от соответствующей плоскости. Средний размер кристаллитов ГЦК-фазы покрытия, осажденного при более высоком давлении, значительно увеличивается и составляет уже (17–20) nm.

РДА анализ напряжений проводили на (TiHfZrVNbTa)N покрытия, осажденного при  $U = -150$  В и  $3 \times 10^{-3}$  давления, используя метод  $\sin^2\psi$ .

Рисунок 3 показывает эволюцию параметра решетки (TiHfZrVNbTa)N кристаллитов, измеренных от (220) межплоскостного расстояния в зависимости от  $\sin^2\psi$ . Линейное изменение наблюдается в угловом  $\psi$  диапазоне 20-72°, с отрицательным наклоном указывающее на наличие сжимающего напряжения. Отклонение от линейности при низких значениях  $\sin^2\psi$  может отражать наличие напряжения градиентов по глубине пленки или в более сложном напряженном состоянии из-за наличия взаимодействующих кристаллитов соседних с гексагональной структурой (Рис. 3). Анализ напряжений был проведен в предположении макроскопически (упругого) изотропного образца, который подвергается осесимметричному двухосному напряженному состоянию в плоскости.

Концентрации элементов составляющих покрытия однородны по толщине. Имплантация ионов  $N^+$  приводит к частичному распылению поверхностного слоя, однако при этом увеличивается концентрация  $N^+$  до 90 at% (рис. 4).

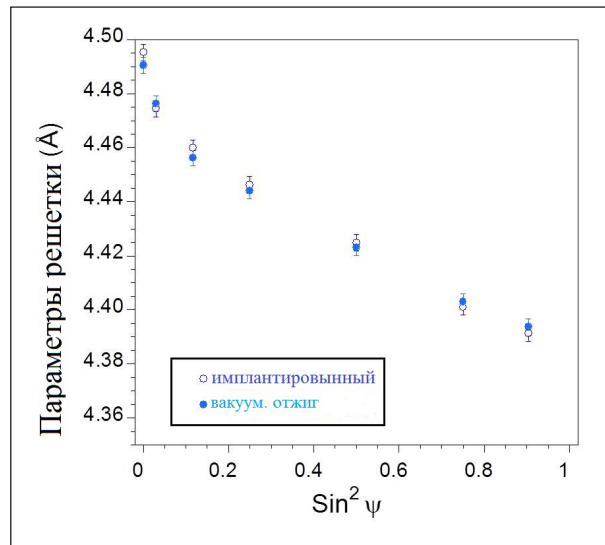


Рисунок 3 – Зависимость параметров решетки от  $\sin^2\psi$  после имплантации и отжига для серии 2

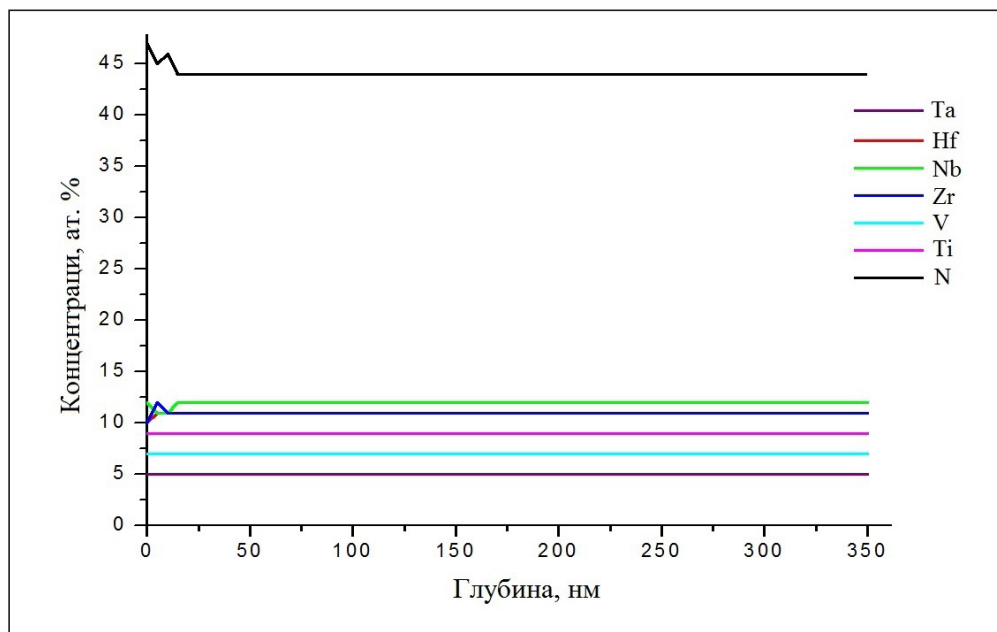
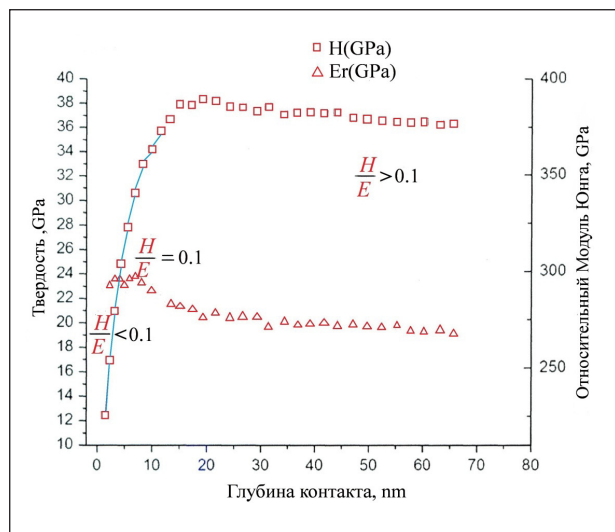


Рисунок 4 – Распределение концентрации элементов по толщине покрытия после осаждения (а), в результате имплантации  $N^+$  (б) для серии 8

Таблица 2 – Распределение концентрации элементов по толщине покрытия

Концентрации, ат. %	Ta	Hf	Nb	Zr	V	Ti	N
578 исходный	5	12	12	11	7	9	44
Распределение концентрации элементов по толщине покрытия после имплантации.							
Концентрации, ат. %	Ta	Hf	Nb	Zr	V	Ti	N
578 после имплантации $N^+$	4	9	10	11	10	10	46

Следует отметить, что увеличение концентрации  $N^+$  до 64 at.% – это интеграл концентрации по глубине анализа покрытия. В реальности на глубине проективного пробега концентрация  $N$  достигает 90 at.%.



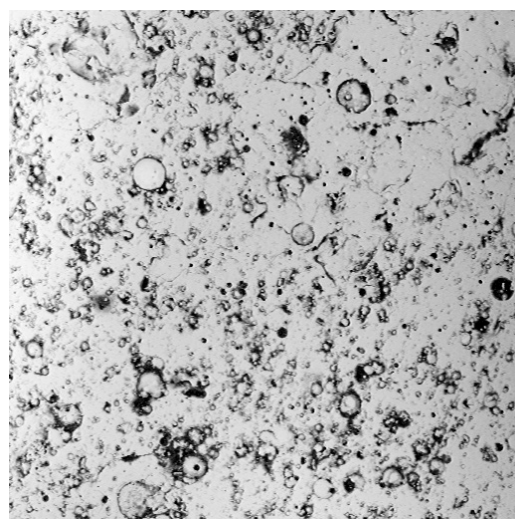
**Рисунок 5** – Результаты измерения твердости и модуля упругости в динамическом режиме для покрытия (TiZrHfVNbTa)N до имплантации  $N^+$ , серия 2 ( $\frac{H}{E}$  – индекс пластичности)

На рис. 5 представлены зависимости нанотвердости и приведенного модуля упругости  $E_r$  от глубины вдавливания. Нанотвердость имеет

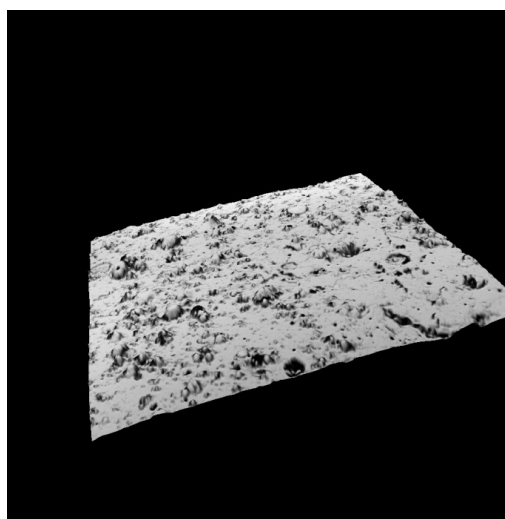
максимальное значение 28 GPa, а модуль упругости составляет 230 – 240 GPa при  $P=3 \times 10^{-4}$  Торг. Следует отметить, что увеличение индекса пластичности  $H/E \geq 0.1$  свидетельствует о превосходной стойкости к износу. Для образцов с покрытиями осажденными при  $3 \times 10^{-3}$  Торг, имеющими более высокую концентрацию  $N$  в покрытии, твердость покрытия возрастает до 34.6 GPa.

Имплантация ионов  $N^+$  дозой  $10^{18}$  см $^{-2}$  приводит к уменьшению твердости на поверхности до 12 GPa, которая начинает возрастать с глубиной и на больших глубинах  $\geq 200$  нм, твердость выходит на максимум (23 GPa), что близко к значению в исходном состоянии (после осаждения).

На рис. 6 представлено изображение поверхности покрытия (Ti-Zr-Hf-V-Nb-Ta)N после осаждения и ионной имплантации  $N^+$  ( $10^{18}$  см $^{-2}$ ). Произошло уменьшение шероховатости поверхности покрытия за счет распыления тонкого слоя с поверхности покрытия (рис.6б). Видна типичная каплевидная фракция, которая часто формируется (из-за отсутствия имплантации) при вакуумно-дуговом испарении катода. На рис. 7 представлены результаты микроанализа образцов по толщине покрытия и подложки (из стали), как видно из этого, толщина покрытия не превышает 6 мкм. Распределение элементов по глубине (толщине) покрытия указывает на его однородность (в пределах погрешности определения EDS).



а



б

**Рисунок 6** – РЭМ-изображение покрытий (Ti-Zr-Hf-V-Nb-Ta)N: серии 2: а) поверхность покрытия, б) вид шероховатости

### Заклучение

При имплантации наноструктурных (TiHfZrNbVTa) N покрытий очень высокими  $10^{18}$  см<sup>-2</sup> дозами ионов N<sup>+</sup> формируется многослойная структура, при этом происходит уменьшение твердости до 12 GPa в приповерхностной области и последующие увеличение с глубиной, где на больших глубинах  $\geq 200$

нм, твердость выходит на максимум (23 GPa). Снижение микротвердости имплантированных образцов обусловлено распылением тонкого слоя поверхности покрытия, что влечет за собой уменьшение шероховатости поверхности покрытия, посредством исключения капельной фракции, которая формируется вследствие эрозии катода при вакуумно-дуговом осаждении.

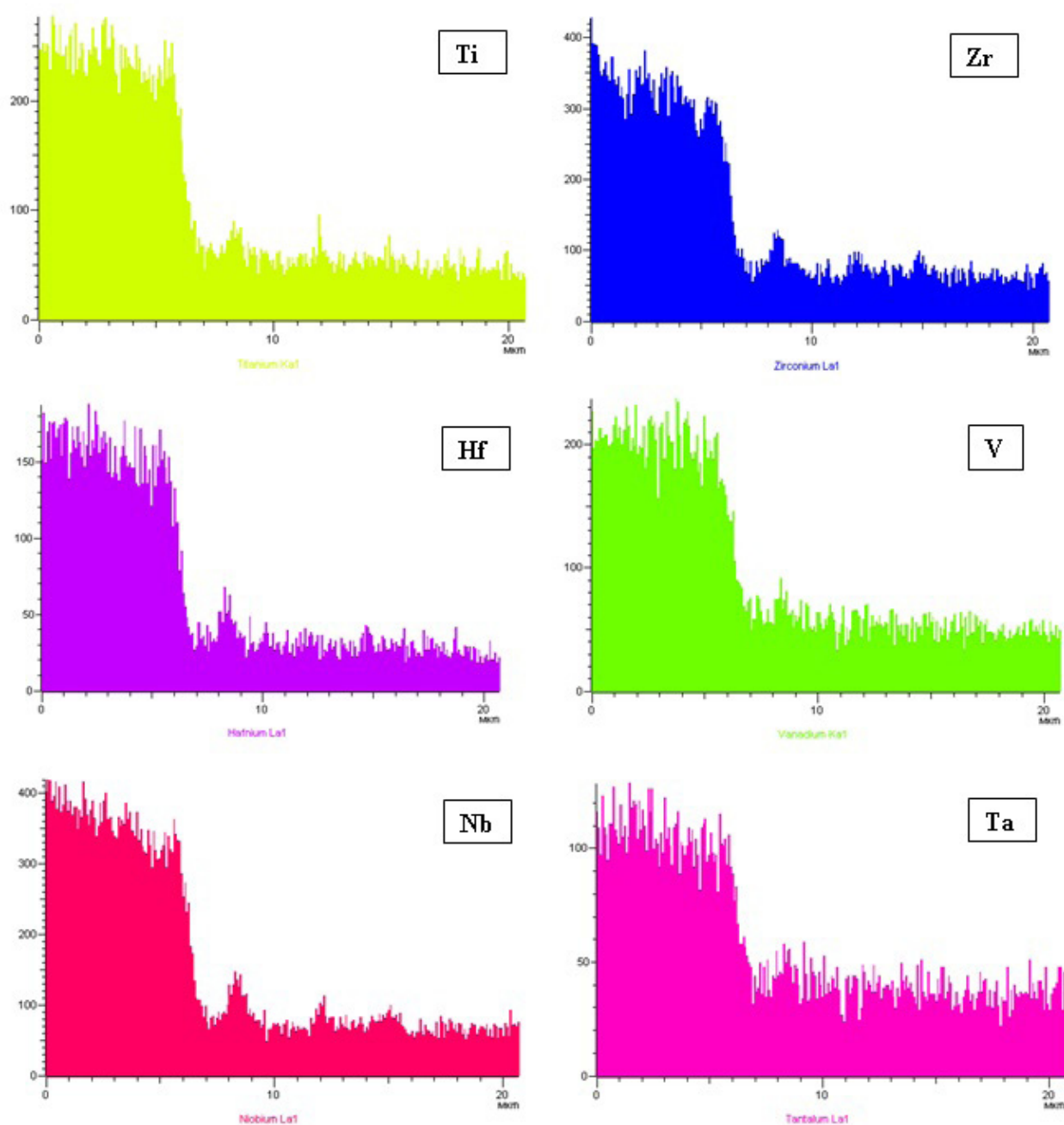


Рисунок 7 – Микроанализ элементов (Ti,Zr,Hf,V,Nb,Ta) на поперечном сечении покрытий серии 2

Повышение давления в камере для осаждения до  $3 \times 10^{-3}$  Торр приводит к значительному повышению концентрации азота в составе покрытия и снижению содержания металлических элементов, таких как Ti, Nb, V.

Полученные покрытия демонстрируют увеличение индекса пластичности  $H/E \geq 0.1$ , что свидетельствует о превосходной стойкости к износу и подтверждено предварительными испытаниями на скретч-тестере.

### Литература

- 1 Pogrebnjak A.D., Tolopa A.M. A revive of high-dose implantation and production of ion mixed structures // *Nuclear Instruments and Methods*. – 1990. – Vol. B52. – P. 24-43.
- 2 Komarov F.F. *Ion Beam Modification of Metals*, Gordon and Breach Science Publishers, Philadelphia. – 1992.
- 3 Lavrentiev V.I., Pogrebnjak A.D. High-dose ion implantation into metals // *Surface and Coatings Technology*. – 1998. – Vol. 99. – P. 24-32.
- 4 Ivasishin O.M., Pogrebnjak A.D., Bratushka S.N. *Nanostructured Layers and Coatings Formed by Ion-Plasma Fluxes in Titanium Alloys and steels*. – Kiev: Academperiodika, 2011. – P. 270.
- 5 Pogrebnjak A.D., Bratushka S.N., Beresnev V.M., Levintant-Zayonts N. Shape memory effect and superelasticity of titanium nickelide alloys implanted with high ion doses // *Russian Chemical Reviews*. – 2013. – Vol. 82, №12. – P. 1135–1159.
- 6 Senkov O.N., Senkova S.V., Dimiduk D.M., Woodward C., Miracle D.B. Oxidation behavior of a refractory NbCrMo0.5Ta0.5TiZr alloy // *Journal of Materials Science* – 2012. – Vol. 47. – P. 6522–6534.
- 7 Salishchev G., Tikhonovsky M.A., Shaysultanov D.G., Stepanov N.D., Kuznetsov A.V., Kolodiy I.V., Tortika A.S., Senkov O.N. Effect of Mn and V on structure and mechanical properties of high-entropy alloys based on CoCrFeNi system // *Journal of Alloys and Compounds*. – 2014. – Vol. 591. – P. 11-24.
- 8 Braic V., Alina Vladescu, Balaceanu M., Luculescu C.R., Braic M. Nanostructured multi-element (TiZrNbHfTa)N and (TiZrNbHfTa)C hard coatings // *Surface and Coatings Technology*. – 2012. – Vol. 211. – P. 117–121.
- 9 Tsai D.C., Huang Y.L., Lin S.R., Liang S.C., Shieu F.S. Effect of nitrogen flow ratios on the structure and mechanical properties of (TiVCrZrY)N coatings prepared by reactive magnetron sputtering // *Applied Surface Science*. – 2010. – Vol. 257. – P. 1361–1367.
- 10 Pogrebnjak A.D., Bagdasaryan A.A., Yakushchenko I.V., Beresnev V. M. The structure and properties of high-entropy alloys and nitride coatings based on them // *Russian Chemical Reviews*. – 2014. Vol.83, № 11. – P. 1027-1061.
- 11 Pogrebnjak A.D., Yakushchenko I.V., Bagdasaryan A.A., Bondar O.V., Krause-Rehberg R., Abadias G., Chartier P., Oyoshi K., Takeda Y., Beresnev V.M., Sobol O.V. Microstructure, physical and chemical properties of nanostructured (Ti-Hf-Zr-V-Nb)N coatings under different deposition conditions // *Materials Chemistry and Physic*. – 2014. – Vol. 147, № 3. – P. 1079-1091.
- 12 Pogrebnjak A.D., Yakushchenko I.V., Bondar O.V., Sobol O.V., Beresnev V.M., Oyoshi K., Amekura H., Takeda Y. The microstructure of a multielement nanostructured (TiZrHfVNbTa)N coating and its resistance to irradiation with Au<sup>-</sup> ions // *Technical Physics Letters*. – 2015. – Vol. 41, № 11. – P. 1054-1057.
- 13 Pogrebnjak A.D., Yakushchenko I. V., Bondar O.V., Sobol O.V., Beresnev V.M., Oyoshi K., Amekura H., Takeda Y. Influence of Implantation of Au<sup>-</sup> Ions on the Microstructure and Mechanical Properties of the Nanostructured Multielement (TiZrHfVNbTa) N Coating // *Physics of the Solid State*. – 2015. – Vol. 57, № 8. – P. 1559-1564.
- 14 Feng X., Tang G., Ma X., Sun M., Wang L. Characteristics of multi-element (ZrTaNbTiW)N films prepared by magnetron sputtering and plasma based on ion implantation // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B*. – 2013. – Vol. 301. – P. 29.
- 15 Uglov V.V., Abadias G., Rovbut A.Y., Zlotski S.V., Saladukhin I.A., Skuratov V.A., Petrovic S. Thermal stability of nanocrystalline (Ti,Zr)0.54Al0.46N films implanted by He<sup>+</sup> ions // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B*. – 2015. – Vol. 354. – P. 269- 273.
- 16 Комаров Ф.Ф., Погребняк А.Д., Константинов С.В. Радиационная стойкость высокоэнтропийных наноструктурированных покрытий (Ti, Hf, Zr, V, Nb)N // *Письма в ЖТФ*. – 2015. – Т. 85, № 10. – С. 105-110.
- 17 Plotnikov S.V., Pogrebnjak A.D., Tleukenov Y.O., Erdybaeva N.K. Functional properties of multilayer vacuum-arc TiN/ZrN coatings // *Materials Science and Engineering*. – 2016. – V. 110.
- 18 Tleukenov Y.O., Plotnikov S.V., Erdybaeva N.K., Pogrebnjak A.D. Studying of nanocomposite films' structure and properties obtained by magnetron sputtering // *Materials Science and Engineering*. – 2016. – Vol. 110.

### References

- 1 A.D. Pogrebnjak, A.M. Tolopa, *Nuclear Instruments and Methods*, B52, 24-43, (1990).
- 2 F.F. Komarov, *Gordon and Breach Science Publishers*, Philadelphia, 1992
- 3 V.I. Lavrentiev, A.D. Pogrebnjak, *Surface and Coatings Technology*, 99, 24-32, (1998).
- 4 O.M. Ivasishin, A.D. Pogrebnjak, S.N. Bratushka, *Nanostructured Layers and Coatings Formed by Ion-Plasma Fluxes in Titanium Alloys and steels*. Kiev, 2011
- 5 A.D. Pogrebnjak, S.N. Bratushka, V.M. Beresnev, N. Levintant-Zayonts. *Russian Chemical Reviews* 82, 1135–1159, (2013).
- 6 O.N. Senkov, S.V. Senkova, Dimiduk D.M., Woodward C., Miracle D.B., *Journal of Materials Science* 47, 6522–6534, (2012).

- 7 G. Salishchev, M.A. Tikhonovsky, D.G. Shaysultanov, N.D. Stepanov, A.V. Kuznetsov, I.V. Kolodiy, A.S. Tortika, O.N. Senkov, *Journal of Alloys and Compounds*, 591, 11-24, (2014).
- 8 V. Braic, A. Vladescu, M. Balaceanu, C.R. Luculescu, M. Braic, *Surface and Coatings Technology*, 211, 117–121, (2012).
- 9 D.C.Tsai, Y.L. Huang, S.R. Lin, S.Сю Liang, F.S. Shieu, *Applied Surface Science* 257, 1361–1367, (2010).
- 10 A.D. Pogrebnyak, A.A. Bagdasaryan, I.V. Yakushchenko, V.M. Beresnev, *Russian Chemical Reviews*, 83, 1027-1061, (2014).
- 11 A.D. Pogrebnyak, I.V. Yakushchenko, A.A. Bagdasaryan, O.V. Bondar, R. Krause-Rehberg, G. Abadias, P. Chartier, K. Oyoshi, Y. Takeda, V.M. Beresnev, O.V. Sobol, *Materials Chemistry and Physics* 147, 1079-1091, (2014).
- 12 A.D. Pogrebnyak, I.V. Yakushchenko, O.V. Bondar, O.V. Sobol, V.M. Beresnev, K. Oyoshi, H. Amekura, Y. Takeda, *Technical Physics Letters*, 41, 1054-1057, (2015).
- 13 A.D. Pogrebnyak, I.V. Yakushchenko, O.V. Bondar, O.V. Sobol, V.M. Beresnev, K. Oyoshi, H. Amekura, Y. Takeda, *Physics of the Solid State*, 57, 1559-1564. (2015).
- 14 X. Feng, G. Tang, X. Ma, M. Sun, L. Wang, *Research Section B*, 301, 29, (2013)
- 15 V.V. Uglov, G. Abadias, A.Y. Rovbut, S.V. Zlotski, I.A. Saladukhin, V.A. Skuratov, S. Petrovic, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B*, 354, 269- 273, (2015).
- 16 F.F. Komarov, A.D. Pogrebnyak, S.V. Konstantinov, *Pisma v ZhETF*, 85:105-110, (2015). (in russ).
- 17 S.V. Plotnikov, A.D. Pogrebnyak, Y.O. Tleukenov, N.K. Erdybaeva, *Materials Science and Engineering*, 110, (2016).
- 18 Y.O. Tleukenov, S.V. Plotnikov, N.K. Erdybaeva, A.D. Pogrebnyak, *Materials Science and Engineering*, 110, (2016).

Мархабаева А.А., Абдуллин Х.А.,  
Лисицын В.М., Немкаева Р.Р.

**Рамановская спектроскопия,  
фотолюминесценция и фото-  
каталитическая активность  
вольфрамата цинка**

В настоящей работе представлены результаты по получению порошков вольфрамата цинка  $ZnWO_4$ . Порошки были получены двумя способами: гидротермальный синтез при температуре  $\sim 95^\circ C$  при атмосферном давлении с последующей термообработкой, и синтез порошков в автоклаве при температуре  $180^\circ C$  и давлении выше атмосферного. Изучены структурные особенности синтезированных порошков, исследованы рамановские спектры и спектры фотолюминесценции, фотокаталитические свойства полученных образцов  $ZnWO_4$  сразу после синтеза и в зависимости от температуры последующего отжига на воздухе. Установлена взаимосвязь морфологии и свойств образцов с технологическими условиями синтеза и температурой последующего отжига. Для получения поликристаллической фазы  $ZnWO_4$  после синтеза при  $95^\circ C$  необходим дополнительный отжиг вплоть до  $500-600^\circ C$ , в то время как синтез при  $180^\circ C$  сразу приводит к получению поликристаллической фазы  $ZnWO_4$ . Обнаружена значительная фотокаталитическая активность синтезированных материалов при разложении тестового вещества родамина под освещением.

**Ключевые слова:** гидротермальный синтез, вольфрамат цинка, фотолюминесценция, фотокаталитическая активность, раман спектроскопия.

Marhabaeva A.A., Abdullin Kh.A.,  
Lisitsyn V.M., Nemkaeva R.R.

**The raman spectroscopy,  
photoluminescence and  
photocatalytic activity of the  
zinc tungstate**

In this paper, the result of obtaining powder tungstate  $ZnWO_4$  is presented. Powders were prepared by two methods: the hydrothermal synthesis at a temperature of about  $95^\circ C$  at atmospheric pressure followed by heat treatment and powder synthesis in autoclave at a temperature of  $180^\circ C$  and at pressure above atmospheric. The structural features of the synthesized powders were studied, the Raman spectra and photoluminescence spectra, photocatalytic properties of the  $ZnWO_4$  obtained after synthesis and subsequent annealing in air were studied. There are relation between morphology and properties of the samples with the technological conditions of synthesis and subsequent annealing temperature. To obtain the polycrystalline phase of  $ZnWO_4$  at synthesis at  $95^\circ C$  was required additional annealing up to  $500-600^\circ C$ , while the synthesis at  $180^\circ C$  leads to the production of a polycrystalline  $ZnWO_4$  phase. A significant photocatalytic activity of synthesized materials in the decomposition of the test substance under the rhodamine lighting.

**Key words:** hydrothermal synthesis, zinc tungstate, photoluminescence, photocatalytic activity, Raman spectroscopy.

Мархабаева А.А., Абдуллин Х.А.,  
Лисицын В.М., Немкаева Р.Р.

**Вольфрамат цинкінің раман  
спектроскопиясы, фото-  
люминесценциясы және  
фотокаталитикалық активтілігі**

Жұмыста цинк вольфраматын  $ZnWO_4$  алу әдістерінің нәтижесі көрсетілген. Ұнтақтар екі жолмен алынған: атмосфералық қысымда және  $\sim 95^\circ C$  температурада келесі термиялық өңдеумен және автоклава  $180^\circ C$  температурада атмосфералық қысымнан жоғары жағдайда. Үлгілердің құрылымдық ерекшеліктері, раман спектрлері, фотолюминесценциясы және фотокаталитикалық белсенділігі зерттелді. Үлгілердің морфологиясы мен қасиеттерінің технологиялық алу шарттарына және термиялық күйдіруге байланысы анықталды. Вольфрамат цинкін  $ZnWO_4$   $\sim 95^\circ C$  температурада синтездеуден кейін поликристалдық фазаны алу үшін үлгілерді  $500-600^\circ C$  дейін ауада күйдіру қажет, ал  $180^\circ C$  температурада синтездеу поликристалдық фазаға әкеледі. Сынақ зат Родамин Б ерітіндісінде алынған үлгілердің ыдырауы кезіндегі фотокаталитикалық активтілігі байқалды.

**Түйін сөздер:** гидротермалды синтез, вольфрамат цинк, фотолюминесценция, фотокаталитикалық активтілік, раман спектроскопиясы.



<sup>1</sup>Казахский национальный университет имени аль-Фараби,  
Республика Казахстан, г. Алматы

<sup>2</sup>Национальная нанотехнологическая лаборатория открытого типа,  
Республика Казахстан, г. Алматы

<sup>3</sup>Национальный исследовательский  
Томский политехнический университет, Россия, г. Томск

\*E-mail: aiko\_marx@mail.ru

## **РАМАНОВСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ, ФО- ТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ И ФОТОКАТАЛИТИ- ЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ ВОЛЬФРАМАТА ЦИНКА**

### **Введение**

В последние годы фотокаталитические процессы интенсивно исследуются [1-3], поскольку фотокатализ является потенциально дешевым и высокопроизводительным методом очистки воды от органических соединений и широкого круга загрязняющих веществ. В процессе фотокаталитической реакции происходит образование электронно-дырочных пар на поверхности полупроводника под действием света и дальнейшее протекание окислительно-восстановительных реакций с участием органических загрязнений, что приводит к их разложению [4-5]. Большими преимуществами фотокаталитической технологии с использованием солнечного освещения являются низкие затраты и экологическая безопасность.

Значительный интерес исследователей обращен к вольфрамату цинка  $ZnWO_4$ , который давно известен как сцинтилляционный материал [6], а в последнее время рассматривается как перспективный для создания электродов суперконденсаторов [7] и полупроводниковых фотокатализаторов [8]. Также в качестве фотокатализаторов используется диоксид титана, оксид цинка и др. Однако, наблюдается недостаточно высокий квантовый выход неравновесных носителей, что связано с высокой степенью рекомбинации носителей заряда, низкой удельной поверхностью, а также малой адсорбционной способностью материалов. Поиск новых полупроводников с повышенными фотокаталитическими свойствами является актуальной задачей современного фотокатализа. В настоящей работе представлены результаты по получению порошков вольфрамата цинка  $ZnWO_4$  гидротермальным методом, исследованы структурные особенности, рамановские и фотолюминесцентные спектры полученных образцов, обнаружена значительная фотокаталитическая активность синтезированных материалов.

### **Экспериментальная часть**

Порошки вольфрамата цинка получены гидротермальным синтезом как при температуре  $\sim 95^\circ\text{C}$  при атмосферном давлении

нии, так и при температуре 180°C и давлении выше атмосферного. В обоих случаях использован водный раствор нитрата цинка гексагидрата  $Zn(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$  (3мМ) и вольфрамата натрия дигидрата  $Na_2WO_4 \cdot 2H_2O$  (3мМ). При атмосферном давлении синтез происходил в стакане, где объем воды составлял 100 мл. Синтез при температуре ~95°C в течение двух часов приводил к значительному испарению воды, после проведения синтеза формировался золь. Полученный золь несколько раз промывался водой, отделялся центрифугированием, затем сушился на воздухе при температуре 90°C. Завершающим этапом являлся термический отжиг образ-

цов на воздухе в интервале от 100°C до 600°C в муфельной печи.

Гидротермальный синтез при температуре 180°C осуществлялся в автоклаве. Ростовый раствор (~50 мл) переносили в тефлоновый стакан объемом 70 мл, стакан помещался в стальной автоклав и герметизировался. Автоклав помещали в предварительно нагретую до температуры синтеза муфельную печь, в которой осуществляли гидротермальный синтез при 180°C в течение 24 часов. Полученный порошок извлекали центрифугированием, отмывали несколько раз, сушили при 90°C на воздухе. В таблице 1 для сравнения приведены режимы получения образцов.

Таблица 1 – Параметры процесса синтеза образцов

Образец	Объем воды	Масса исходных реагентов	Температура синтеза	Время синтеза	Температура и время отжига	Выход массы. г
№1	100 мл	3 ммоль	180°C	24 час	нет	0.785
№2	50 мл	3 ммоль	~95°C	2 час	100-600°C, 1 час	0.560

## Результаты и их обсуждение

На рисунке 1 представлены SEM изображения полученных образцов. Как видно из рисунка, порошки, синтезированные при ~95°C (рис. 1а), представляют собой спекшийся материал с размерами гранул до нескольких микрон. Напротив, порошки, синтезированные в автоклаве, имеют весьма малые размеры гранул в диапазоне нескольких нанометров (рис. 1б). Следовательно, порошки, синтезированные при 180°C, намного легче диспергируются, чем порошки, полученные при ~95°C.

*Рамановская спектроскопия.* Известны две основные структурные конфигурации кристаллов  $MeWO_4$  [9]: шеелиты – к которым принадлежат вольфраматы кальция, стронция, бария и свинца; и вольфрамиты, к ним относятся вольфраматы кадмия, цинка и магния. Вольфрамат цинка  $ZnWO_4$  имеет структуру вольфрамита с моноклинной сингонией, точечной группой  $C_{2h}$  симметрии и пространственной группой  $P2_1/c$ . Параметры решетки  $a=4,69263 \text{ \AA}$ ,  $b=5,72129 \text{ \AA}$ ,  $c=4,92805 \text{ \AA}$  и  $\beta = 90,6321^\circ$  [9]. Элементарная

ячейка  $ZnWO_4$  показана на рисунке 2, где ионы Zn и W расположены в центрах октаэдров, а в вершинах находятся ионы кислорода O1 и O2.

По результатам работ [9, 11] у вольфрамата цинка имеется 36 мод решетки в центре зоны Бриллюэна:  $8A_g + 10B_g + 8A_u + 10B_u$ , из них 18 активных рамановских мод. В таблице 2 приведены частоты 18 рамановских мод согласно литературным данным [9, 11].

В настоящей работе была изучена структура образцов в зависимости от температуры отжига методом рамановской спектроскопии. Спектры были сняты на установке NTegra Spectra (NT-MDT), где источником света служит синий лазер с длиной волны 473 нм. В таблице 2 приведены экспериментальные результаты по рамановским полосам в образцах, полученных в настоящей работе. Из таблицы видно, что результаты совпадают с литературными данными для  $ZnWO_4$ , есть незначительное смещение полос в образцах, полученных двумя способами, это может быть связано с размерами кристаллитов в полученных порошках в зависимости от условий синтеза.

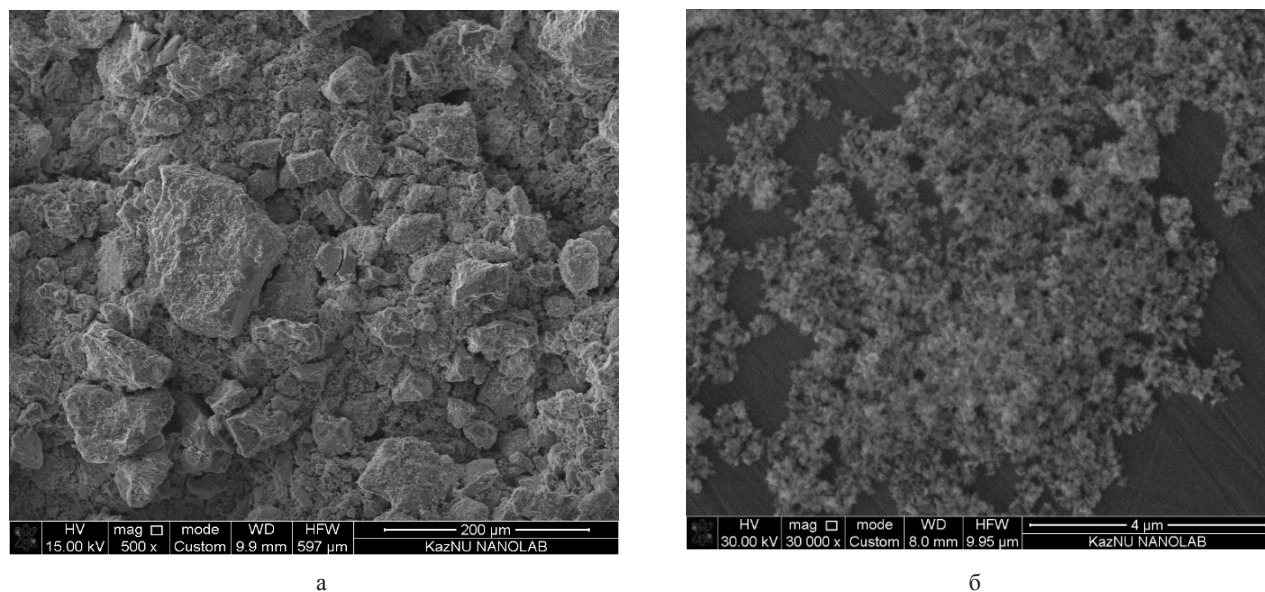


Рисунок 1 – SEM снимок порошков  $ZnWO_4$ , синтезированных при  $\sim 95^\circ C$  (а) и при  $180^\circ C$  (б)

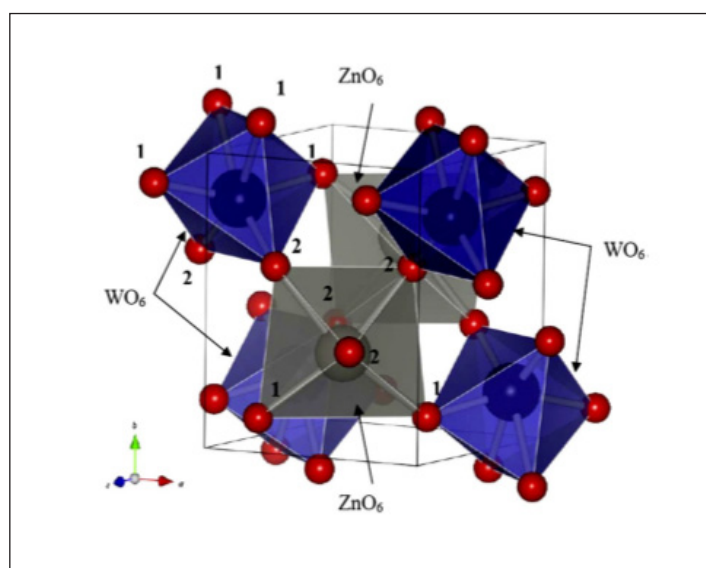


Рисунок 2 – кристаллическая структура вольфрамата цинка [10]

Таблица 2 – Частоты фоннных рамановских полос ( $cm^{-1}$ ) в синтезированных порошках и сравнение с литературными данными для  $ZnWO_4$

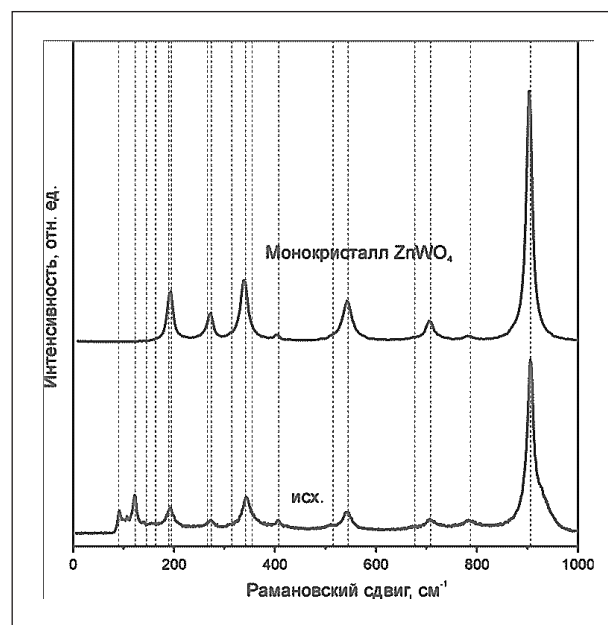
Моды	Данные работы [11]	Образцы, синтезированные при $180^\circ C$ , после отжига	Образцы, синтезированные при $\sim 95^\circ C$ и отожженные при $600^\circ C$
$B_g$	91	91	90
$A_g$	123	123	123
$B_g$	145.5	145	145
$B_g$	163.5	164.3	164

Моды	Данные работы [11]	Образцы, синтезированные при 180°C, после отжига	Образцы, синтезированные при ~95°C и отожженные при 600°C
$B_g$	189.5	190	189
$A_g$	195	193.6	196
$B_g$	266	266	263
$A_g$	274	273.6	275
$B_g$	314.5	315	314
$A_g$ (внутреннее)	341.5	342	343
$B_g$	355	355	353
$A_g$ (внутреннее)	407.5	406.8	407
$B_g$	515.5	515.3	514
$A_g$	545	545.5	546
$B_g$ (внутреннее)	677	676.9	677
$A_g$ (внутреннее)	708.5	708.2	709
$B_g$ (внутреннее)	787	784.4	786
$A_g$ (внутреннее)	906	906.1	907

На рисунке 3 приведены спектры комбинационного рассеяния образцов, синтезированных в автоклаве при температуре 180°C. Максимальный по энергии пик имеет частоту около 906  $\text{см}^{-1}$ , и соответствует колебаниям связи W-O. Как видно из рисунка 3, сразу после синтеза при 180°C образец имеет рамановский спектр, содержащий все линии  $\text{ZnWO}_4$ , а дальнейший отжиг несколько увеличивает интенсивность этих полос и не влияет на их полуширину. Для сравнения на рис. 3 приведен рамановский спектр контрольного монокристалла  $\text{ZnWO}_4$ , который содержит не все рамановские линии из-за ориентационной зависимости рамановского рассеяния. Можно заметить, что полуширина линий монокристалла такая же, как и у образца, выращенного в автоклаве. Поэтому можно заключить, что температура синтеза 180°C достаточна для формирования фазы вольфрамата цинка.

Иная картина рамановских спектров наблюдается в образцах, синтезированных при 95°C. На рисунке 4 представлены спектры образца, синтезированного при ~95°C и отожженного при разных температурах отжига. Видно, что исходный образец содержит линии  $\text{ZnWO}_4$  с весьма низкими интенсивностями, большими полуширинами и имеющими сдвиг. Только при термическом отжиге постепенно появляются все линии рамановского рассеяния, соответствующие фазе  $\text{ZnWO}_4$ . До температуры отжига ниже 300-400°C наблюдается широкие пики, что свидетельствует о присутствии аморфной фазы. От-

жиг при 400-600°C приводит к формированию кристаллической фазы. Узкие пики при 600°C свидетельствуют о хорошо сформированной кристаллической структуре.

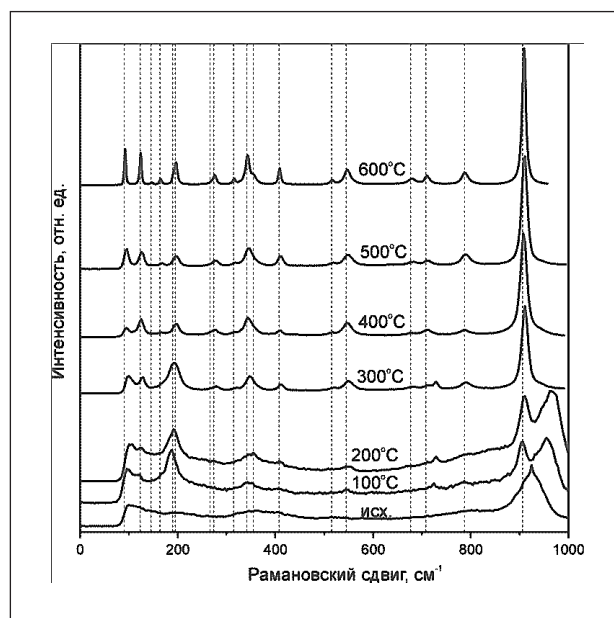


**Рисунок 3** – Рамановский спектр образцов, синтезированных при 180°C, сразу после синтеза, для сравнения приведен спектр монокристалла, пунктирными линиями указаны положения рамановских полос  $\text{ZnWO}_4$  по литературным данным [11]

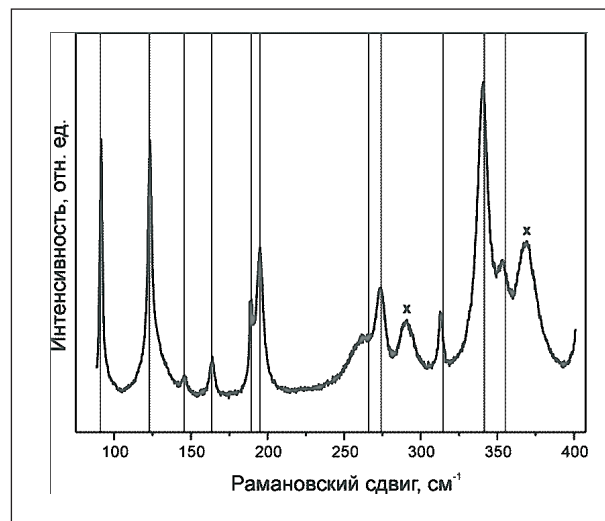
В спектре присутствуют широкие полосы, например, в области  $190\text{ см}^{-1}$ , однако при использовании дифракционной решетки с большим числом штрихов можно разделить полосу на пики при  $189$  и  $196\text{ см}^{-1}$ . (рис 5). То же самое наблюдается для области  $\sim 270$  и  $\sim 350\text{ см}^{-1}$ , как видно при сравнении рис. 4 с рисунком 5, эти широкие пики расщепляются, что совпадает с литературными данными.

**Фотолюминесценция.** Изучены фотолюминесцентные (ФЛ) свойства полученных порошков вольфрамата цинка, спектры ФЛ измерены на люминесцентном спектрометре Cary Eclipse (Agilent) при комнатной температуре, источником возбуждения была ксеноновая лампа. Возбуждение осуществлялось на длине волны  $300\text{ нм}$ .

На рис. 6(a) приведены спектры ФЛ порошков  $\text{ZnWO}_4$ , полученных при  $\sim 95^\circ\text{C}$ . Приведены спектры ФЛ как исходного образца, так и после отжига. В спектре ФЛ наблюдается широкая полоса в области  $380\text{--}650\text{ нм}$  с максимумом на  $476\text{ нм}$  и полушириной  $0.71\text{ эВ}$ . Видно, что с ростом температуры интенсивность ФЛ растет в  $30\text{--}300$  раз. Повышение температуры отжига не приводит к образованию каких-либо дополнительных центров, влияющих на форму спектра люминесценции.



**Рисунок 4** – Раман спектр образцов синтезированных при  $\sim 95^\circ\text{C}$  и ожённые при разных температурах отжига, пунктирными линиями указаны положения рамановских полос  $\text{ZnWO}_4$  по литературным данным [11]



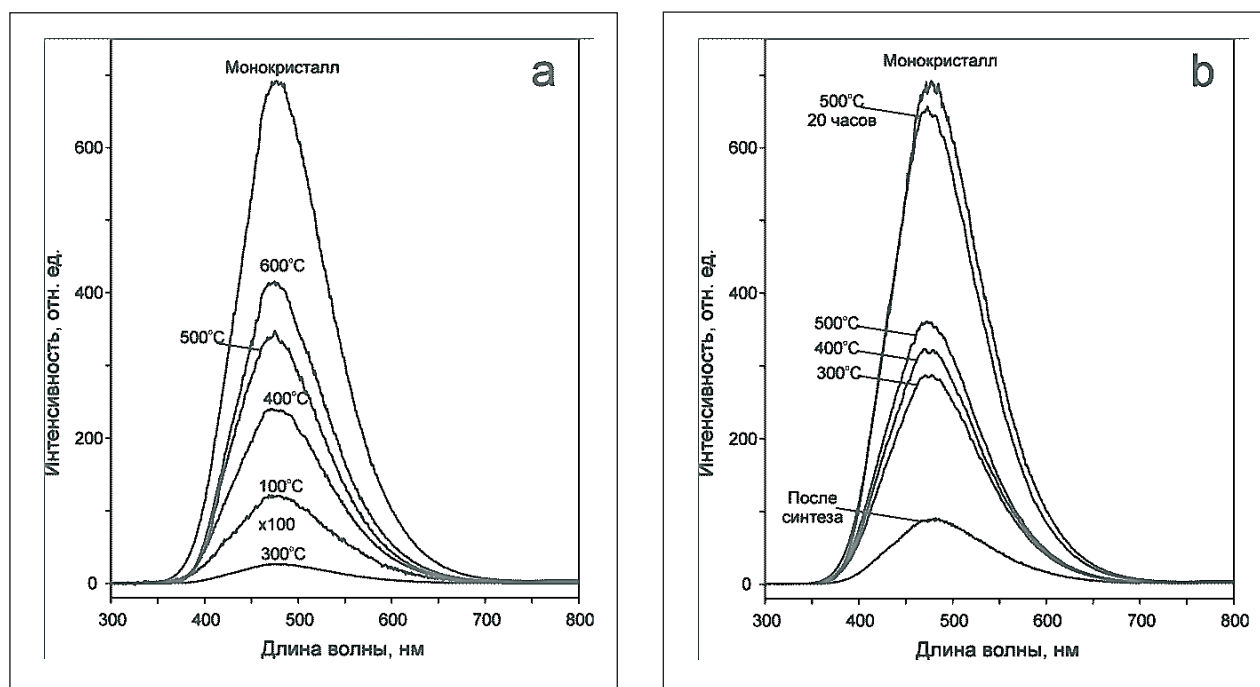
**Рисунок 5** – Рамановские спектры порошков, синтезированных при  $\sim 95^\circ\text{C}$  и отожженных при  $600^\circ\text{C}$ , записанные с высоким разрешением, пунктирными линиями указаны положения рамановских полос  $\text{ZnWO}_4$  по литературным данным [11], пики, отмеченные крестиками (x), появляются из-за дефекта использованной дифракционной решетки и, возможно, являются гармониками линий при  $91$  и  $123\text{ см}^{-1}$ .

По результатам работы [12] известно, что спектры возбуждения и люминесценции вольфрамата цинка связаны с электронным переходом между состояниями кислорода  $\text{O}(2p)$  и вольфрама  $\text{W}(5d)$  в группе  $\text{WO}_6$ . В работе [13] высокую эффективность люминесценции вольфрамата цинка объясняют присутствием собственных дефектов, где центрами свечения является ионы кислорода. Наличие в  $\text{ZnWO}_4$  собственных дефектов объясняется нестехиометрией соединения. Также установлено, что температурный отжиг в атмосфере кислорода при  $900^\circ\text{C}$  в течение  $7$  часов приводит к разрушению собственных дефектов, сформированных при синтезе. Эти данные и результаты настоящей работы свидетельствует о том, что для вольфрамата цинка интенсивность ФЛ спектров с ростом температуры отжига растет, однако отжиг при высоких температурах, например, выше  $900^\circ\text{C}$ , приводит к уменьшению эффективности ФЛ. Можно заключить, при гидротермальном синтезе при  $95^\circ\text{C}$  формируется лишь малая доля фазы  $\text{ZnWO}_4$  в образце, а отжиг приводит к постепенному росту вклада этой фазы вплоть до температур отжига  $600^\circ\text{C}$ . Однако даже после такого отжига интенсивность ФЛ не достигает интенсивности ФЛ в монокристаллическом образце.

На рисунке 6 представлены спектры ФЛ порошков, синтезированных в автоклаве при 180°C (рис 6.б). Из сравнения с образцами, синтезированными при ~95°C и отожжёнными при 400°C видно, что сразу после синтеза в образце присутствует значительная доля сформированной фазы  $ZnWO_4$ . Интенсивность ФЛ также растет с ростом температуры изохронного (1 час) отжига в интервале 300-500°C. Можно заметить, что интенсивность ФЛ порошков, синтезированных при 180°C и отожженных при 500°C в течение 20 часов, практически сравнивается с интенсивностью ФЛ монокристалла.

**Фотокатализ.** Для оценки фотокаталитической активности полученных порошков  $ZnWO_4$  были проведены эксперименты по исследованию процесса фотодеградации тестового органиче-

ского вещества – красителя родамина В. В качестве аппаратуры для фотодеградации использован охлаждаемый проточной водой кварцевый реактор, внутри которого расположена ртутная лампа UL Q 14W 4P SE (Германия) мощностью 14 Вт. Раствор родамина объемом 125 мл, содержащий 9 мг порошка вольфрамата цинка, обрабатывали в ультразвуковой ванне в течение 10 мин и перемешивали 30 мин при комнатной температуре в темноте до установления равновесия. Затем раствор с красителем и порошком  $ZnWO_4$  заливали в реактор, при включенной магнитной мешалке производилась экспозиция светом, и каждые 30 мин в течение 2 часов брался забор проб водного раствора Родамина В для измерения спектров оптической плотности на оптическом спектрофотометре Lambda 35.



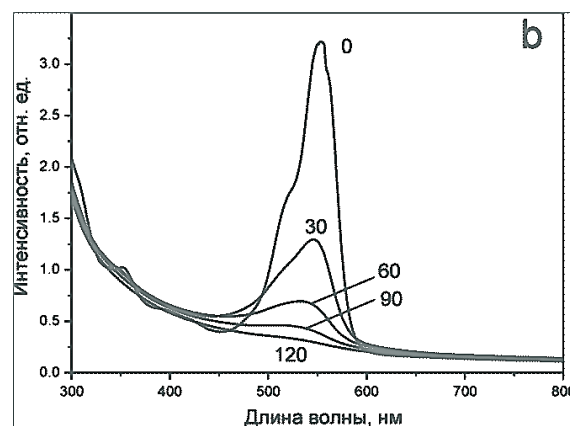
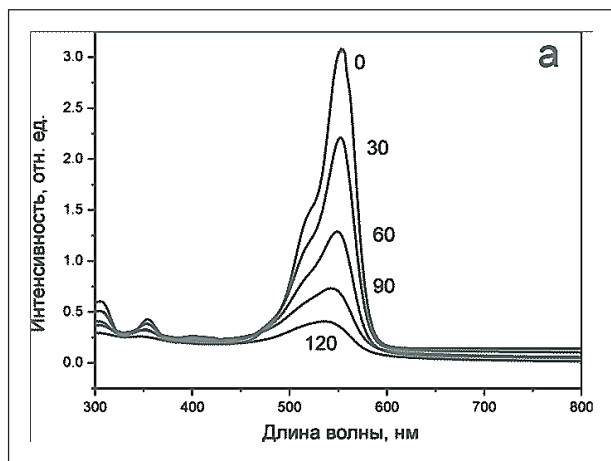
**Рисунок 6** – Спектры фотолюминесценции порошка  $ZnWO_4$ , синтезированного при ~95°C (а) и при 180°C (б), сразу после синтеза и после отжига, для разной температуры отжига, для сравнения приведен спектр ФЛ монокристалла  $ZnWO_4$ .

На рисунке 7 представлены спектры оптической плотности раствора родамина с порошком вольфрамата цинка, синтезированного при нормальных условиях при ~95°C с последующим отжигом при 500°C (рис. 7а) и порошки, синтезированные при 180°C (рис. 7б) при нейтральном рН. На рисунке показаны исходные спектры и спектры после засветки ультрафиолетовой лампой в течение 30, 60, 90 и 120 мин.

На рисунке 8 показана кинетика спада оптической плотности в полосе поглощения родамина от времени засветки для порошка при ~95°C при разных температурах отжига (рис. 6а). с повышением температуры отжига увеличивается фотокаталитическая активность. То есть при увеличении степени кристалличности образцов в области отжига до 500°C их фотокаталитическая активность растет. Однако заметим, что при

температуре отжига 600°C активность начинает уменьшаться. Можно предположить, что это связано с указанными выше результатами о том, что при достижении высокотемпературного интервала уменьшается количество собственных дефектов, что согласуется с данными работы [14].

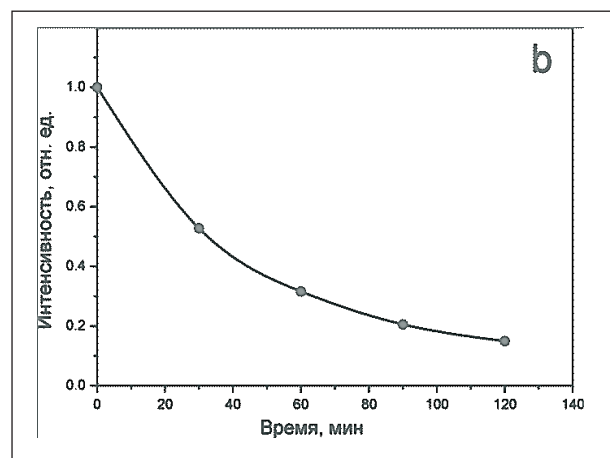
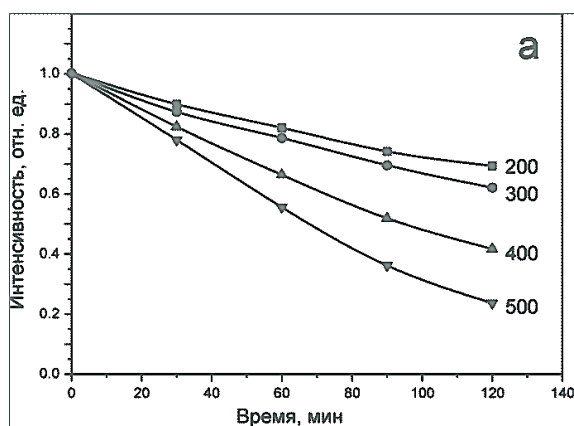
Уменьшение фотокаталитической активности при высокотемпературном отжиге также можно объяснить тем, что при увеличении температуры отжига происходит спекание порошков, и размеры зерен увеличиваются. При этом удельная поверхность материала уменьшается [8].



**Рисунок 7** – Спектры поглощения водного раствора Родамин Б с порошком вольфрамата цинка синтезированного при ~95°C (а) и с порошками при 180°C при продолжительности облучения 0, 30, 60, 90, 120 мин.

На рисунке (рис. 8b) приведены кривые деградации раствора с порошком вольфрамата цинка, синтезированного при 180°C. Видно, что порошки, синтезированные в автоклаве при температуре 180°C, имеют более высокую фотокаталитическую активность. Это объясняется тем, что, как показывают рамановские результаты (рис. 3), сразу после синтеза в автоклаве порош-

ки имеют высокую степень кристалличности. Кроме того, фотокаталитическая активность материалов во многом зависит от удельной поверхности полупроводника. Из SEM результатов (рис. 1) видно, что порошки, синтезированные в автоклаве при температуре 180°C, имеют высокую дисперсность, соответственно, у них большая удельная поверхность.



**Рисунок 8** – Кинетические кривые фотокаталитического окисления водного раствора Родамин Б: а – с порошком, синтезированным при 95°C и отожжённым при разных температурах от 200 до 500°C, б – с порошком, синтезированным в автоклаве при 180°C.

## Выводы

В работе проведен синтез порошков вольфрамата цинка. Показано что кристаллическую фазу вольфрамата цинка  $ZnWO_4$  можно получать гидротермальным синтезом при  $95^\circ C$  с последующей термообработкой и гидротермальным синтезом в автоклаве при  $180^\circ C$ . Изучены структурные особенности полученных образцов, по результатам исследования рамановских спектров можно сделать вывод, что порошки, синтезированные при  $180^\circ C$  в автоклаве, в отличие от порошков, синтезированных при  $95^\circ C$  при атмосферном давлении, имеют кристаллическую фазу, и зарегистрированы все 18 рамановские активные моды. Получена зависимость фотокаталитической активности и интенсивности фотолюминесценции полу-

ченного материала от температуры отжига. Показано, что оптимальной температурой отжига, при которой наблюдается высокая интенсивность фотолюминесценции и фотокаталитическая активность, является интервал  $400-500^\circ C$ . Дальнейшее увеличение температуры отжига не приводит к увеличению интенсивности ФЛ и фотокаталитической активности. Также показано, что фотокаталитические свойства зависят от размеров гранул полученных порошков  $ZnWO_4$ . Можно предположить, что причиной высокой фотокаталитической активности являются высокая удельная поверхность и дефекты структуры, сформированные при синтезе и низкотемпературном отжиге. Однако отжиг выше температур  $500-600^\circ C$  приводит к разрушению собственных дефектов и к уменьшению фотокаталитической активности.

## Литература

- 1 Tasbihi M., Bendyna J.K., Notten P.H.L., Hintzen H.T. (Bert). A Short Review on Photocatalytic Degradation of Formaldehyde // Journal of Nanoscience and Nanotechnology – 2015. – Vol. 15. – P.6386–6396.
- 2 Gayaa U.I., Abdullah A.H. Heterogeneous photocatalytic degradation of organic contaminants over titanium dioxide: A review of fundamentals, progress and problems // Journal of Photochemistry and Photobiology C: Photochemistry Reviews. 2008. – Vol.9 – p. 1–12.
- 3 Bhatkhande D.S., Pangarkar V.G., Beenackers A.A.C.M. Photocatalytic degradation for environmental applications – a review // Journal of Chemical Technology and Biotechnology. – 2002. – Vol.77. – P. 102 – 116.
- 4 Jo W.□K., Tayade R.J. Recent developments in photocatalytic dye degradation upon irradiation with energy□efficient light emitting diode // Chinese Journal of Catalysis. – 2014. – Vol.35. – P.1781–1792.
- 5 Rochkind M., Pasternak S., Paz Y. Using Dyes for Evaluating Photocatalytic Properties: A Critical Review // Molecules. – 2015. – Vol.20. – P. 88-110.
- 6 Kraus H., Mikhailik V.B., Ramaches Y., Day D., Hutton K.B., Telfer J. Feasibility study of a  $ZnWO_4$  scintillator for exploiting materials signature in cryogenic WIMP dark mater searches // Phys. Lett. B. – 2005. – Vol.610. – P.37-44.
- 7 Zhang L., Wang Z., Wang L., Zhang Y. «reparation of graphene/ $ZnWO_4$  composites and its electrochemical properties for lithium –ion batteries // Material Letters. – 2013. – P. 9-12.
- 8 Huang G., Zhang C., Zhu Y. « $nWO_4$  photocatalyst with high activity for degradation of organic contaminants» // Journal of Alloys and Compounds. – 2007. – Vol. 432. – P. 269–276.
- 9 Siriwong P., Thongtem T., Phuruangrat A., Thongtem S. Hydrothermal synthesis, characterization, and optical properties of wolframite  $ZnWO_4$  nanorods // CrystEngComm. – 2011. – Vol.13. – P.1564–1569.
- 10 Brik M.G., Nagirnyi V., Kirm M. A-initio studies of electronic and optical properties of  $ZnWO_4$  and  $CaWO_4$  single crystals // Materials chemistry and physics. – 2012. – Vol.134. – P. 1113-1120.
- 11 Perakis A., Sarantopoulou E., Raptis C. Pressure and temperature dependent raman study of  $ZnWO_4$  // High Pressure Research. – 2000. – Vol. 18. –P. 181-187.
- 12 Mikhailik V.B., Kraus H., Miller G., Mykhaylyk M.S., Wahl D. Luminescence of  $CaWO_4$ ,  $CaMO_4$  and  $ZnWO_4$  crystals under different excitations // Journal of applied physics. – 2015. – Vol.77. – P.083523(8).
- 13 Лисицын В.М., Карипбаев Ж.Т., Лисицына Л.А., Тупицына И.А., Купчишин А.И. Фотолюминесценция кристаллов вольфрамата цинка, подвергнутых термической обработке в атмосфере кислорода и водорода // Известия вузов. Физика. – 2014. – №9/3. – С.132-136;
- 14 Gao B., Fan H., Zhang X., Song L. Template – free hydrothermal synthesis and high photocatalytic activity of  $ZnWO_4$  nanrods // Materials science and engineering B. – 2012. – Vol.177. – P.1126-1132.

## References

- 1 M. Tasbihi, J.K. Bendyna, P.H.L. Notten, H.T. (Bert) Hintzen, Journal of Nanoscience and Nanotechnology, 15, 6386–6396, (2015).
- 2 U.I. Gayaa, A.H. Abdullah, Journal of Photochemistry and Photobiology C: Photochemistry Reviews, 9, 1–12, (2008).



- 3 D.S. Bhatkhande, V.G. Pangarkar, A.A.C.M. Beenackers, *Journal of Chemical Technology and Biotechnology*, 77, 102-116, (2002).
- 4 W.□K. Jo, R.J. Tayade, *Chinese Journal of Catalysis*, 35, 1781–1792, (2014).
- 5 M. Rochkind, S. Pasternak, Y. Paz, *Molecules*, 20, 88-110, (2015).
- 6 H. Kraus, V.B. Mikhailik, Y. Ramaches, D. Day, K.B. Hutton, J. Telfer, *Phys. Lett. B*, 610- 37-44, (2005).
- 7 L. Zhang, Z. Wang, L. Wang, Y. Zhang, *Material Letters*, 9-12, (2013).
- 8 G. Huang, C. Zhang, Y. Zhu, *Journal of Alloys and Compounds*, 432, 269–276, (2007).
- 9 P. Siriwong, T. Thongtem, A. Phuruangrat, S. Thongtem, *CrystEngComm.*, 13, 1564–1569, (2011).
- 10 M.G. Brik, V. Nagirnyi, M. Kirm, *Materials chemistry and physics*, 134, 1113-1120, (2012).
- 11 A. Perakis, E. Sarantopoulou, C. Raptis, *High Pressure Research*, 18, 181-187, (2000).
- 12 V.B Mikhailik, H. Kraus., G. Miller., M.S Mykhaylyk., D. Wahl, *Journal of applied physics* 97, 083523(8), (2015).
- 13 V.M. Lisitsyn, ZH.T. Karipbayev, L.A. Lisitsyna, I.A. Tupitsyna, A.I. Kupchishin, *Izvestiya vuzov. Fizika*, 9(3), 132-136, (2014). (in russ).
- 14 B. Gao, H. Fan, X. Zhang, L. Song, *Materials science and engineering B* 177, 1126-1132, (2012).

Умирзаков А.Г., Мереке А.А.,  
Бейсенов Р.Е., Муратов Д.А.,  
Рақыметов Б.А.

**Импульсное лазерное  
напыление электролитического  
слоя YSZ полученного горячим  
прессованием мишени**

В статье приводятся описание методики горячего прессования мишени циркония, стабилизированного иттрием для использования в импульсном лазерном напылении электролитического слоя твердооксидных топливных элементов. Горячим прессованием изготавливается мишень циркония, стабилизированного иттрием с процентным соотношением компонентов  $ZrO_2$  и  $Y_2O_3$  92:8%. Приводятся аналитические исследования и результаты параметров полученной мишени, и осажденного на подложку кремния электролитического слоя (СЭМ, АСМ, EDX). Научная работа направлена на решение актуальнейшей проблемы по снижению рабочих температур твердооксидных топливных элементов с 850 – 1000 °С до 400 – 550 °С, что достижимо, как показывают результаты исследований, при уменьшении толщины пленки электролита нанесенного тонкопленочной технологией и ультратонком электролите, осажденный с целью уменьшения рабочей температуры, размера и веса топливного элемента. Исследование морфологии показало образование шероховатой поверхности. Элементный анализ осажденного слоя электролита YSZ выявил 8% содержание иттрия в структуре, а циркония в два раза меньше.

**Ключевые слова:** водородная энергетика, тонкопленочный твердооксидный топливный элемент, электролит, горячее прессование.

Umirzakov A.G., Mereke A.L.,  
Beisenov R.E., Muratov D.A.,  
Rakymetov B.A.

**Pulsed laser deposition of YSZ  
electrolyte layer obtained by hot  
pressing of the target**

The article describes a technique of the hot pressing yttrium stabilized zirconium target for use in a pulsed laser deposition of the electrolyte layer for solid oxide fuel cells. Hot pressed target made of zirconium stabilized with yttrium percentage of  $ZrO_2$  and  $Y_2O_3$  components are 92:8%. It is shown analytical studies and the results of the parameters of obtained target and deposited electrolytic layer on the silicon substrate (SEM, AFM, EDX). Scientific work aimed at solving urgent problems to reduce the operating temperature of solid oxide fuel cells from 850 – 1000 °C to 400 – 550 °C, which is achievable, as the results of research, with a decrease of the electrolyte thickness layer deposited thin-film technology and ultra-thin electrolyte deposited for the purpose of reducing the operating temperature, the size and weight of the fuel cell. Morphology studies showed the formation of a rough surface. Elemental analysis of the deposited YSZ electrolyte layer revealed an 8% of yttrium content in the structure, and zirconium was half as much.

**Key words:** hydrogen energy, thin-film solid oxide fuel cell, electrolyte, hot pressing.

Умирзаков А.Г., Мереке А.А.,  
Бейсенов Р.Е., Муратов Д.А.,  
Рақыметов Б.А.

**Ыстық престау арқылы  
алынған YSZ-ді импульсті-  
лазерлі қондырғы көмегімен  
электролиттік қабатты тұндыру**

Мақалада қаттыоксидті отындық элементтің электролиттік қабатын өсіретін импульсті-лазерлі қондырғыға арналған иттриймен тұрақтандырылған цирконий нысанын ыстық престау әдістемелігі келтірілген. Ыстық престауде (компоненттер қатынасы:  $ZrO_2$  және  $Y_2O_3$ ; 92:8%) иттриймен тұрақтандырылған цирконий нысаны алынады. Алынған нысанның және кремний төсенішіне отырғызылған электролиттік қабатының сараптамалық зерттеулері мен нәтижелері келтірілген (СЭМ, АСМ, EDX). Ғылыми жұмыс қатты оксидті отындық элементтің жұмыс істеу температурасын 850 – 1000 °С-дан 400 – 550 °С-ге дейін төмендетудегі өзекті деген мәселені шешуге бағытталған. Бұл мәселені зерттеу нәтижелері көрсеткендей электролиттік қалыңдығын жұқа қабаттарға арналған технология бойынша және ультра жұқа қабат ретінде төмендету арқылы шешуге болады. Бұл өз кезегінде отындық элементтің жалпы жұмыс температурасын, көлемін және салмағын төмендетуге септігін тигізеді.

Морфологияны зерттеу беттің кедір-бұдырлығын көрсетті. YSZ электролитінің тұндырылған қабатын қарапайым талдау, құрлымында итридің үлесі 8% екенін ал циркони екі есе аз екенін көрсетті.

**Түйін сөздер:** сутекті энергетика, жұқа қабықшалы қатты оксидті отындық элемент электролит, ыстық престау.

**ИМПУЛЬСНОЕ  
ЛАЗЕРНОЕ НАПЫЛЕНИЕ  
ЭЛЕКТРОЛИТИЧЕСКОГО  
СЛОЯ YSZ  
ПОЛУЧЕННОГО  
ГОРЯЧИМ  
ПРЕССОВАНИЕМ  
МИШЕНИ****Введение**

В мире возрос интерес к твердооксидным топливным элементам (ТОТЭ). Это обусловлено рядом преимуществ этих генераторов электроэнергии перед другими типами топливных элементов, возможность электрохимического генерирования с КПД более 60%, как на водороде любого качества, так и на любом углеводородном топливе (природный газ, легкие и тяжелые углеводороды, спирты, биогаз и т.д.); высокое КПД, экологичность, бесшумность [1]. Создаваемый электролитический слой определяет тип топливного элемента. ТОТЭ обычно состоит из твердооксидного слоя электролита с окислительным электродом (катод) на одной стороне электролита и топливного электрода (анода) с другой стороны [2].

Выбор метода эпитаксиального тонкопленочного формирования пленки YSZ электролита обусловлен тем, что традиционные порошковые технологии (прессование с последующим высокотемпературным спеканием) позволяют формировать слои толщиной от 10 мкм и выше и поэтому не могут использоваться в разработках, направленных на минимизацию толщины функциональных слоев ТЭ [3]. Метод импульсного лазерного напыления (ИЛН) является одним из наиболее подходящих методов напыления тонких пленок с точки зрения стабильности процесса, возможности независимого регулирования основных параметров процесса напыления, и как результат, получение однородных покрытий с необходимыми структурными и эксплуатационными характеристиками, а также возможности обработки поверхностей с большей площадью. Важную роль в формировании электролитического слоя при напылении играет правильно изготовленная мишень с учетом всех технологических циклов и необходимых параметров.

Обработка керамических материалов методом горячего прессования каждый год находит все большее применение в лабораторных исследованиях и производстве, в первую очередь, это связано с тем, что оборудование и оснастка становится доступнее и дешевле. Кроме того, метод горячего прессования получил распространение в связи с развитием нанотехнологий и микроиндустрии. Одновременное воздействие давления и тем-

пературы на нанопорошки позволяет получать образцы с плотностью, близкой к максимальной. Прессы горячего прессования, разработанные для термомеханической обработки материалов, совмещают в себе простоту исполнения и долгий срок службы, обладая при этом невысокой стоимостью. Статья представляет собой методику формирования мишеней для ИЛН и затрагивает технологические аспекты горячего прессования на примере электролитических мишеней из керамических материалов.

*Технология получения мишеней YSZ горячим прессованием*

Технология горячего прессования включает следующие стадии:

- измельчение;
- кальцинирование;
- спекание.

Изготовление мишеней для нанесения электролитов топливных элементов методом импульсной лазерной абляции производится из смесей ОСЧ порошков оксидов иттрия и циркония. В работе использовались порошки  $Y_2O_3$  и  $ZrO_2$  компании Aldrich Chemistry чистотой 99.99%. Учитывая параметры пресс-формы горячего пресса, а также держателя мишени камеры ИЛН, для изготовления 1 таблетки мишени с процентным соотношением компонентов  $ZrO_2$  и  $Y_2O_3$  92:8% взвешивались навески общим весом 30 грамм. Взвешивание проводилось на аналитических весах с **высокой точностью**. Полученные навески предварительно смешивались, и промалывались в агатовой ступке.

Получение как можно более мелкого порошка с однородной дисперсностью, достигается при помощи процесса измельчения. Измельчение выполнялось до и после каждой кальцинации, в общей сложности по три раза для каждого образца.

В настоящее время мы используем SPEX SamplePre 8000M для получения мелкого порошка (рисунок 1). The Spex Mill – высокоэнергетическая шаровая мельница с карбид вольфрамовым цилиндром с диаметром шаров 5мм. Образцы помещаются в цилиндр и подвергаются измельчению (дисперсность меньше 1 микрона).

*Кальцинирование*

Процесс кальцинирования вещества ниже его температуры плавления производится для достижения специфических реакций, таких как изменение физических и химических характеристик. Каждый образец проходит кальцинирование по три раза в течение 17-20 часов, при температуре 1100 °С в атмосфере кислорода (рисунок 2).



Рисунок 1 – Высокоэнергетическая шаровая мельница SPEX SamplePre 8000M



Рисунок 2 – Печь для кальцинирования порошка

*Спекание*

Горячее прессование – одновременное применение высокой температуры и сжимающего напряжения, чтобы объединить мелкозернистые порошки в частично или полностью спеченные структуры [4]. Технология, представленная на рисунке 3, была разработана для порошковой металлургии в промышленности и успешно применяется в керамическом производстве в течение

последних нескольких десятилетий. Давление увеличивает движущую силу для уплотнения, уменьшая температуру обработки, требуемую для процесса спекания. Кроме того, процесс го-

рячего прессования приводит к меньшим общим размерам зерна, более точному контролю, за микроструктурой и гибкостью функциональной классификации керамического слоя.

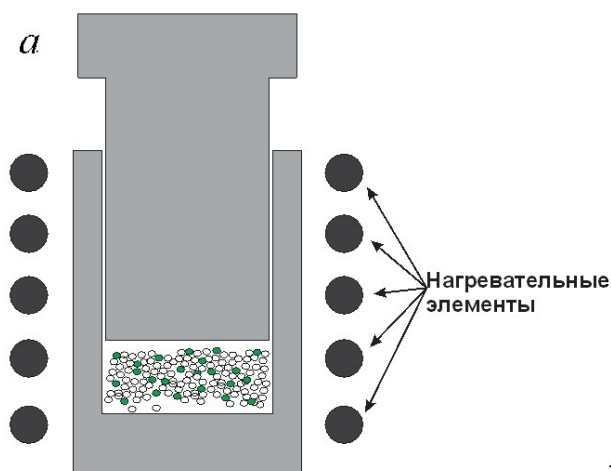


Рисунок 3 – Схематическое изображение системы горячего прессования (а) и установка горячего прессования (б)

Измельченная смесь порошков  $Y_2O_3$  и  $ZrO_2$  помещается в пресс-форму, затем в камеру для горячего прессования, где происходит откачивание камеры до вакуума  $10^{-6}$  Торр. Нагрев осуществлялся в 3 этапа:

1 – нагрев до  $1200\text{ }^{\circ}\text{C}$  со скоростью  $25$  градусов в минуту (всего  $40$  минут);

2 – удержание температуры  $1200\text{ }^{\circ}\text{C}$  (в течение  $60$  минут);

3 – охлаждение  $5\text{ }^{\circ}\text{C}$  в секунду (до комнатной температуры).

Как только образец претерпел кальцинирование и измельчение три раза, образец подвергается спеканию. Это процесс сжатия порошка в конкретную форму, с последующим нагреванием при  $1200\text{--}1400\text{ }^{\circ}\text{C}$ . Продуктом является твердооксидная мишень (рисунок 4). Мишень иттрия, стабилизированного цирконием (YSZ) спекалась под давлением пресса  $20$  тонн, при температуре  $1200\text{ }^{\circ}\text{C}$ , время спекания  $60$  минут.

*Свойства мишеней YSZ полученных горячим прессованием*

Кроме хорошей ионной проводимости, мишень YSZ обладает высокой микротвёрдостью, устойчивостью к коррозии, обладает низкой теплопроводностью и химической стабильностью при высоких температурах [5].

На рисунке 5 представлена поверхность слоя YSZ, осажденной из полученной мишени на подложке Si(100) при  $35\text{ Гц}$  и  $600\text{ }^{\circ}\text{C}$ . Высокая частота импульсов лазера приводит к образованию поверхности с неоднородными размерами частиц на поверхности. Анализ EDX (рисунок 6) показывает на правильное соотношение компонентов, которое изначально было задано для мишени. Содержание  $8\%$  иттрия по сравнению с другими компонентами в слое YSZ показывает возможность варьирования свойствами электролита за счет изменения концентрации основного компонента.

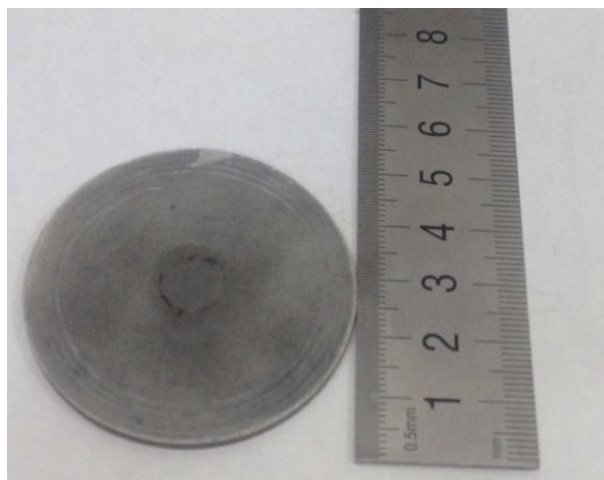
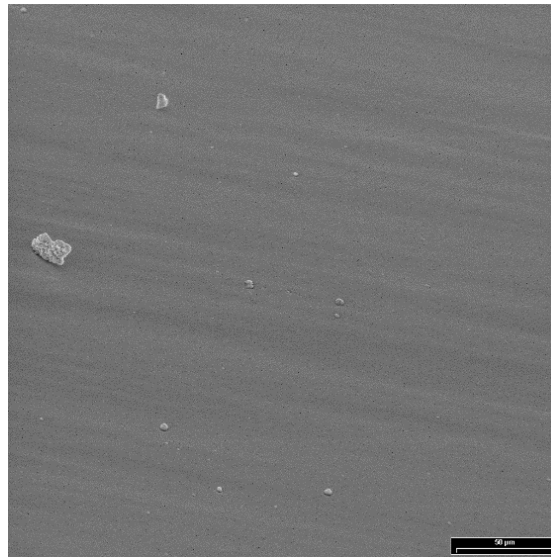
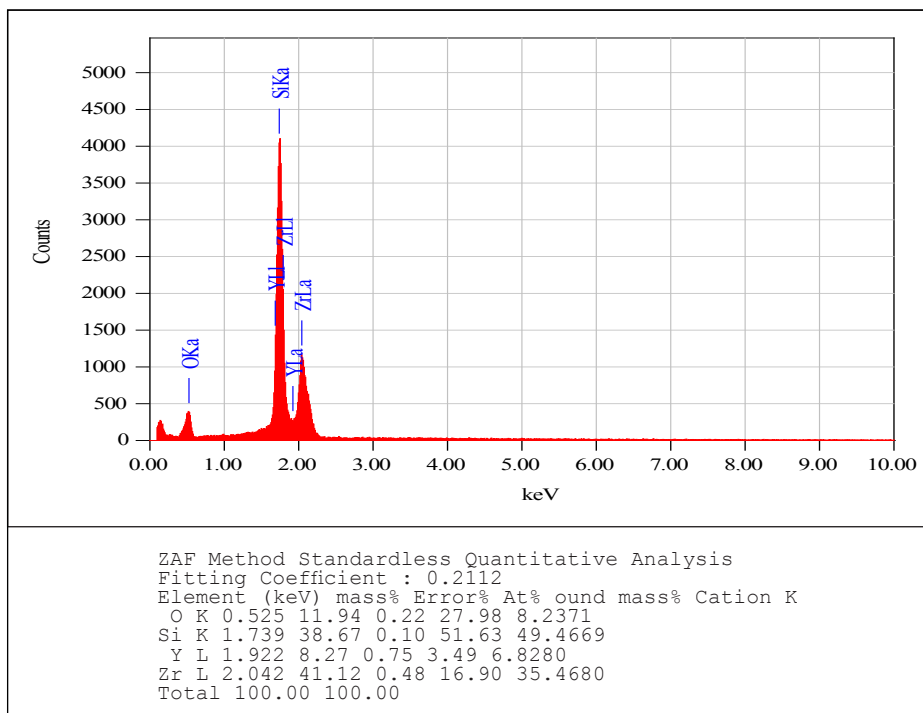


Рисунок 4 – Твердооксидная мишень для ИЛН



**Рисунок 5** – Изображение слоя YSZ осажденного методом ИЛН, полученного на СЭМ



**Рисунок 6** – EDX анализ слоя YSZ осажденного методом ИЛН

Поверхность и размеры кристаллитов осажденного слоя YSZ, также были исследованы на атомно-силовом микроскопе Solver PRO M (НТ МДТ) (рисунок 7). В связи с большой шерохо-

ватостью, образец был исследован контактным методом. Сканирование поверхности 5x5 мкм показало на образование квазисферических частиц большого диаметра.

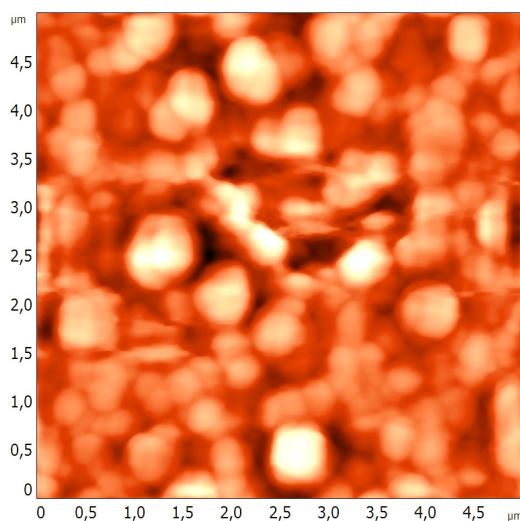


Рисунок 7 – Снимки слоя YSZ, полученные на АСМ

### Заключение

Горячим прессованием при температуре 1200 °С и давлении 20 тонн получена мишень YSZ из измельченных на шаровой мельнице порошков  $Y_2O_3$  и  $ZrO_2$  с соотношением 8:92 %. Проведено осаждение слоев тонкопленочного электролита YSZ на подложки кремния при температуре 500 – 700 °С, частоте лазера 35 Гц и энергии 270 – 560 мДж. Исследование морфологии слоя электролита методами СЭМ

и АСМ показало образование шероховатой поверхности с большим количеством субмикронных частиц, формирование которых объясняется высокой частотой импульсов лазерного излучения. Элементный анализ осажденного слоя электролита YSZ выявил 8% содержание иттрия в структуре, а циркония в два раза меньше предполагаемого, что можно объяснить недостаточностью энергии облучения мишени для достижения частиц циркония поверхности образца.

### Литература

- 1 Lynd L.R., Cushman J.H., Nichols R.J. Wyman CE: Fuel ethanol from cellulosic biomass // Science. – 1991. – Vol.25. – P.1318–1323.
- 2 Wang M.Q., Huang H.-S. A full fuel-cycle analysis of energy and emissions impacts of transportation fuels produced from natural gas. – Argonne, Illinois: Center for Transportation Research Argonne National Laboratory, 1999.
- 3 Kordesch K.V., Simader G.R: Environmental impact of fuel cell technology // Chem Rev – 1995. – Vol. 95(1). – P.191–207.
- 4 Eon Woo Park, Hwan Moon, Moon-soo Park, Sang Hoon Hyun. Fabrication and characterization of Cu–Ni–YSZ SOFC anodes for direct use of methane via Cu-electroplating // International journal of hydrogen energy. – 2009. – Vol. 34. – P.5537–5545.
- 5 Ignatiev A., Issova A., Eleuov M. Nanostructured Thin-Film Solid Oxide Fuel Cells // Chemical Bulletin of KazNU. – 2011. – №3 (63). – P.5432.

### References

- 1 L.R. Lynd, J.H. Cushman, R.J. Nichols, C.E. Wyman, Science, 25, 1318–1323, (1991).
- 2 M.Q. Wang, H.S. Huang, A full fuel-cycle analysis of energy and emissions impacts of transportation fuels produced from natural gas. – Argonne, Illinois: Center for Transportation Research Argonne National Laboratory, 1999.
- 3 K.V. Kordesch, G.R. Simader, Chem Rev., 95(1), 191–207, (1995).
- 4 Eon Woo Park, Hwan Moon, Moon-soo Park, Sang Hoon Hyun, International journal of hydrogen energy, 34, 5537–5545, (2009).
- 5 A. Ignatiev, A. Issova, M. Eleuov, Chemical Bulletin of KazNU, 3(63), 5432, (2011).

Немкаева Р.Р.,  
Мухаметкаримов Е.С.,  
Алпысбаева Б.Е.

**Сравнение методик атомно-силовой микроскопии при исследовании аморфных углеродных пленок**

В работе представлены результаты исследования аморфной углеродной пленки методами атомно-силовой микроскопии. Рассмотрены принципы основных методик измерений и параметры, определяющие латеральное разрешение и разрешение по оси z, а также особенности различных типов зондов. Проведено сравнение и выявлены особенности применения полуконтактной и контактной методик при исследовании мягких пленок с низкой адгезией. Показано, что при выборе метода сканирования атомно-силовой микроскопии всегда необходимо учитывать множество факторов – в первую очередь, это особенности образца и информация, которую необходимо извлечь в результате измерений. Если образец достаточно жесткий и необходимо провести точные измерения, то рекомендуется использовать мягкий зонд с длинной балкой в контакте. В случае «сложных» образцов – мягких, с сильно развитой поверхностью и плохой адгезией, применяется метод полуконтакта. Рассмотрен метод измерения толщины пленки и проведен анализ погрешности с учетом выбранного режима измерений. Погрешность измерений толщины с использованием полуконтактного зонда и контактной методики составила 15 нм. В то же время, полуконтактный метод позволил без повреждения поверхности исследуемого образца получить четкое изображение и корректно оценить глубину царапины.

**Ключевые слова:** атомно-силовая микроскопия, полуконтактная и контактная методики, адгезия пленки, измерение толщины, выбор метода, погрешность.

Nemkayeva R.R.,  
Mukhametkarimov Y.S.,  
Alpysbayeva B.Ye.

**Comparison of atomic-force microscopy methods during the study of amorphous carbon films**

The paper presents study results of amorphous carbon film using atomic-force microscopy. Principles of main measuring techniques and parameters, determining lateral resolution and resolution by z axis, as well as special features of different tips are considered. Comparison and application peculiarities are performed for semicontact and contact modes when study soft films with low adhesion. It is shown, that choosing scanning method of atomic-force microscopy it is always required to take many factors into consideration – firstly, the sample peculiarities and information to be obtained as a result of measurements. In case of sufficiently hard sample and necessity to perform precise measurements, it is recommended to use soft probe with long cantilever in contact mode. In case of «difficult» samples – soft, with extended surface and low adhesion, semicontact mode is used. Method for measurement of film's thickness is considered and analysis of accuracy depending on measuring mode is performed. Error of measurement of thickness using semicontact probe in contact mode averaged 15 nm. At the same time, semicontact mode allows to obtain fine image without surface damages and correctly assess the depth of a scratch.

**Key words:** atomic-force microscopy, semicontact and contact modes, film's adhesion, thickness measurements, choose of method, error of measurements

Немкаева Р.Р.,  
Мухаметкаримов Е.С.,  
Алпысбаева Б.Е.

**Аморфты көміртекті қабықшаларды зерттеуге арналған атомдық күштік микроскопия әдістемелерін салыстыру**

Берілген жұмыста аморфты көміртекті қабықшаларын атомдық күштік микроскопия әдістерімен зерттеу нәтижелері келтірілген. Негізгі зерттеу әдістемелердің принциптері мен латеральді көрсеткішті және z өсі бойынша көрсеткіштерді анықтайтын параметрлер, сонымен қатар бірнеше типті зондтардың ерекшеліктері қарастырылған. Төменгі адгезиялы жұмсақ қабықшаларды зерттеуге арналған жартылай жанамалы және жанамалы әдістемелерді қолдану ерекшеліктері салыстырылды. Атомдық күштік микроскопия зерттеу әдісін таңдаған кезде бірнеше факторларды ескеру қажет екені көрсетілген – бірінші кезекте, үлгінің ерекшеліктері мен өлшеу нәтижесінде алыну керек мәлімет. Егер алынған үлгі мейлінше қатты болса және дәлірек өлшеулер жүргізу керек болса, жанамасында ұзын балкалы жұмсақ зондты пайдалану ұсынылады. «Күрделі» үлгі жағдайында болса, яғни жұмсақ, күрделі дамыған бетті және әлсіз адгезиялы болса жартылай жанамалы әдіс қолданылады. Қабықша қалыңдығын өлшеу әдісі қарастырылған, сонымен қатар таңдап алынған өлшеу режимін ескере отырып қателіктер талдауы жүргізілген. Жартылай жанамалы және жанамалы зондты қолдану кезінде өлшенген қалыңдықтың қателігі 15 нм құрады. Сол мезетте, жартылай жанамалы әдіс зерттелініп отырған үлгінің бетін зақымға келтірмесіз анық бейнесін алуға және сызат қалыңдығын дәл бағалауға мүмкіндік берді.

**Түйін сөздер:** атомдық күштік микроскопия, жартылай жанамалы және жанамалы әдістемелер, қабықша адгезиясы, қалыңдықты өлшеу, әдісті таңдау, қателік.



## СРАВНЕНИЕ МЕТОДИК АТОМНО-СИЛОВОЙ МИКРОСКОПИИ ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ АМОΡФНЫХ УГЛЕРОДНЫХ ПЛЕНОК

### Введение

Известно, что оптический и электронный микроскопы способны генерировать двумерные изображения поверхности образца, с увеличением порядка 1.000х крат для оптического микроскопа, и несколько сотен тысяч крат (100.000х) для электронного микроскопа.

Однако, эти микроскопы не способны измерять образец в вертикальном направлении, без предварительного создания скола или среза – высоту (например, частиц) или глубину (кратеры, отверстия, углубления) особенностей рельефа исследуемого образца.

Атомно-силовой микроскоп (АСМ), который использует острый зонд для исследования особенностей поверхности в ходе растрового сканирования, способен отображать топографию поверхности с очень высоким увеличением, до 1.000.000х. Кроме того, измерение в АСМ ведется в трех измерениях, горизонтальная плоскость x-y и вертикальная z составляющая. Разрешение в z-направлении обычно выше, чем в направлении x-y.

Стандартной единицей, используемой при измерениях на атомно-силовом микроскопе, является нанометр. Увеличение в АСМ это отношение актуального размера детали рельефа к размеру этой детали, изображенной на экране компьютера [1].

В случае изображения сверх высокого разрешения, общее поле зрения может составлять 100 нм. В этом случае увеличение на 500 мм экране компьютера выражается следующим образом:  $\text{увеличение} = 500 \text{ мм} / (100 \text{ нм} * 1 \text{ мм} / 1.000.000 \text{ нм}) = 5.000.000\text{х}$ .

Атомно-силовой микроскоп имеет два измерения разрешения; в плоскости измерения и в направлении перпендикулярном поверхности.

Разрешение в плоскости x-y зависит от геометрии зонда, который используется для сканирования. В общем случае, чем острее зонд, тем выше разрешение АСМ изображения.

Вертикальное разрешение в АСМ определяется относительными колебаниями зонда над поверхностью. Источниками колебаний являются акустический шум, колебания пола, термические колебания. Для получения максимального вертикаль-

ного разрешения требуется минимизировать все колебания инструмента.

При сканировании образца с помощью АСМ на поверхность действует постоянная сила через зонд на конце кантилевера. Измерение этой силы с помощью кантилевера в АСМ проводят двумя методами. В первом методе напрямую измеряется отклонение кантилевера. Во втором методе, кантилевер колеблется и измеряется изменение параметров колебаний (частота, фаза).

#### *Режим отклонения*

Используя систему обратной связи в АСМ, возможно производить сканирование образца с фиксированным отклонением кантилевера. Благодаря тому, что отклонение кантилевера прямо пропорционально силе, действующей на поверхность, в течение сканирования на поверхность действует постоянная сила. Такой режим сканирования часто называют контактным.

#### *Колебательный режим*

Кантилевер в АСМ может совершать колебания с помощью пьезоэлектрической керамики. Когда колеблющийся кантилевер приближается к поверхности, происходит изменение амплитуды и фазы колебаний. Эти изменения могут быть измерены и соотнесены с силой на поверхности. Данный метод имеет несколько названий, включая безконтактный режим и метод прерывистого

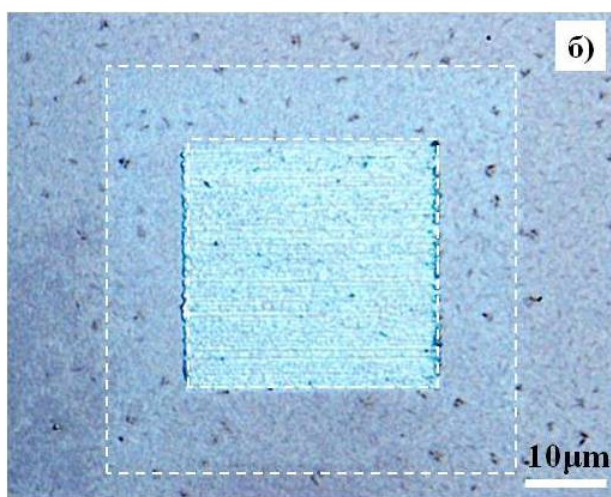
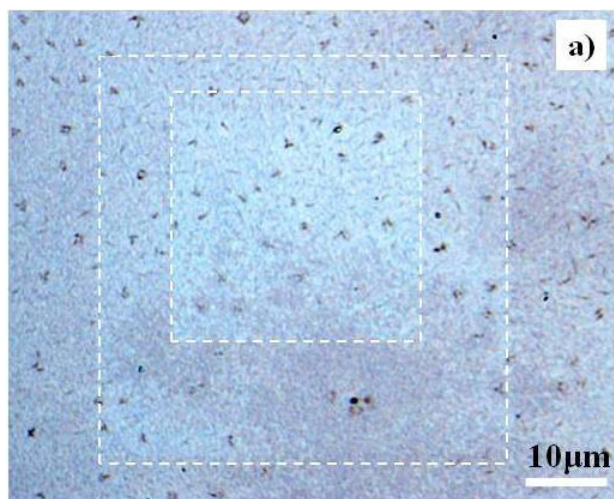
контакта. Важно, что зонд при этом не простукивает поверхность, потому что может сломаться или повредить образец.

Выбор определенного метода сканирования обусловлен рядом факторов, в частности, особенностями образца и информацией, которую необходимо получить в результате измерений.

### **Эксперимент и обсуждение результатов**

В данной работе пленка аморфного углерода, модифицированная атомами серебра, была исследована методом атомно-силовой микроскопии (АСМ) на установке Solver Spectrum (NT-MDT) в полуконтактном и контактном режимах.

На рисунке 1 представлены оптические микрофотографии поверхности пленки после АСМ сканирования различными методами. Сканирование проводилось с применением полуконтактного зонда типа NSG10 в два этапа: 1) скан 30x30 мкм в полуконтакте (рис. 1а) и в контакте (рис. 1б); 2) контрольный скан 50x50 мкм в полуконтакте. Отчетливо видно, что в отличие от полуконтактного метода применение контактной методики привело к существенному изменению поверхности, что говорит о значительной мягкости и слабой адгезии материала.



**Рисунок 1** – Оптические микрофотографии углеродной пленки после сканирования а) в полуконтакте; б) в контакте

Контрольное сканирование площади 50x50 микрон показало, что при контакте происходит частичное разрушение поверхности исследуемого материала, что показано на АСМ изо-

бражении на рисунке 2. Изучение поперечного сечения данного скана позволило установить, что глубина царапин от зонда на поверхности образца составила примерно 15 нм. При работе

АСМ в контактном режиме обычно используют кантилеверы с относительно малыми коэффициентами жесткости, что позволяет обеспечить высокую чувствительность и избежать нежелательного чрезмерного воздействия зонда на образец. Несмотря на то, что контактный режим с использованием контактных зондов считается самым чувствительным, у него имеются ограничения. Недостаток контактных АСМ методик

состоит в непосредственном механическом взаимодействии зонда с поверхностью. Это часто приводит к поломке зондов и разрушению поверхности образцов в процессе сканирования. Кроме того, контактные методики практически не пригодны для исследования образцов, обладающих малой механической жесткостью, таких как структуры на основе органических материалов и биологические объекты [2].

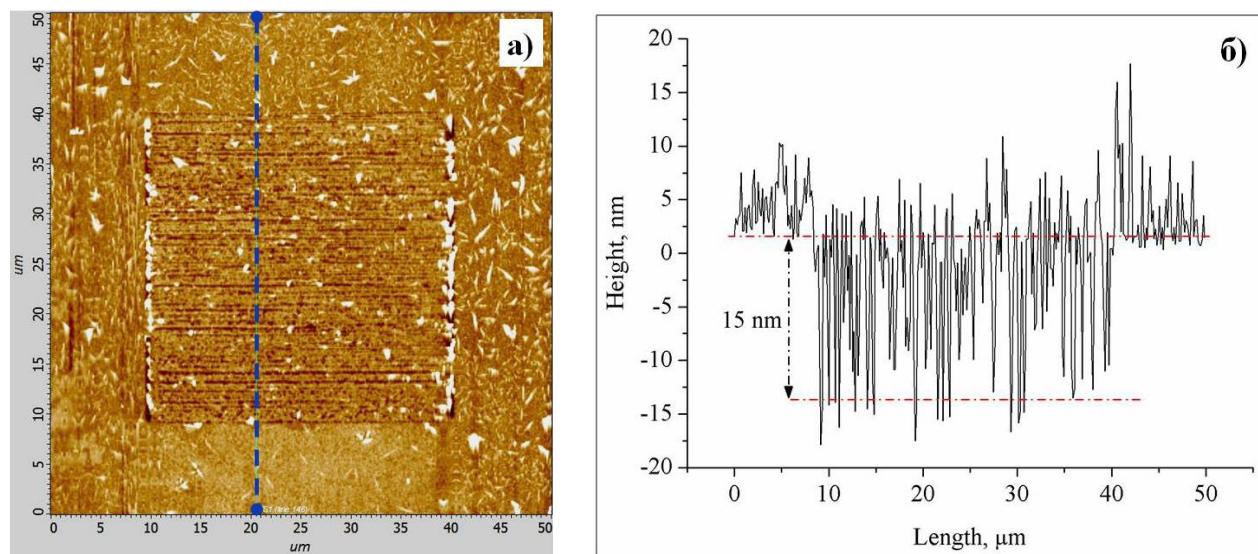


Рисунок 2 – а) АСМ изображение и б) профиль поперечного сечения измененной поверхности образца (вдоль синей пунктирной линии)

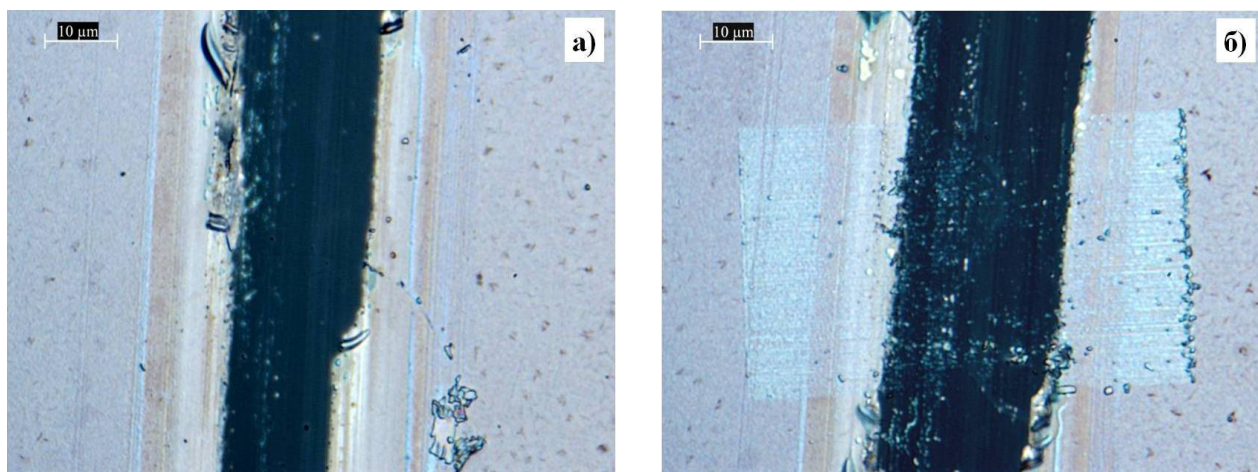
Известно, что полуконтактные зонды являются универсальными, т.е. их можно применять как в полуконтактном, так и в контактном режимах. Кроме того, применяя такой тип зондов, можно, не отходя от требуемой области и не меняя зонда, исследовать образец различными методиками, получив при этом максимальное количество информации, в частности, фазовый контраст. Для сравнения, типичный полуконтактный зонд (NSG10) имеет длину кантилевера 95 мкм и жесткость 11,8 Н/м, в то время как длина стандартного контактного кантилевера (CSG10) составляет 225 мкм, а жесткость 0,11 Н/м. При этом радиус закругления зонда для обоих типов кантилеверов составляет 10 нм.

В данной работе также была проведена оценка толщины исследуемой пленки различными методиками. Для этого тонким пинцетом формировалась царапина на всю глубину образца, на оптическом микроскопе находилась наиболее подходящая область, и далее проводилось сканирование данной области с помощью атомно-силового ми-

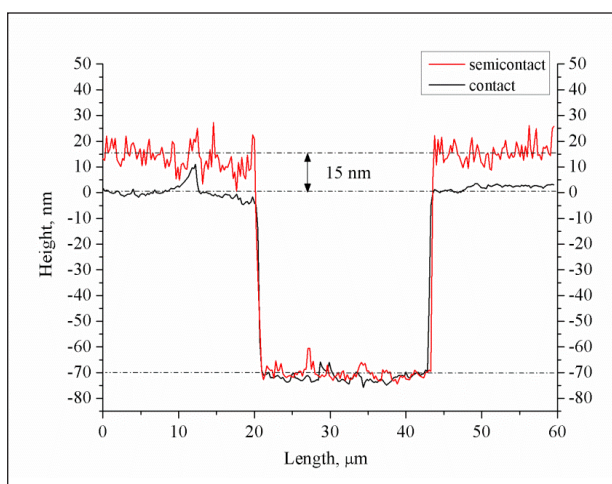
кроскопа. На рисунке 3 представлены оптические микрофотографии области царапины на пленке после сканирования полуконтактным (рис.3а) и контактным (рис.3б) методами. Как и в предыдущем случае, в результате контактного сканирования наблюдается изменение поверхности.

Изучение профиля поперечного сечения данных сканов, представленного на рисунке 4, позволило оценить погрешность измерения толщины исследуемой пленки. Так, толщина пленки, измеренная полуконтактной методикой, составила 85 нм (красная линия), а результаты контактного измерения показали значение 70 нм (черная линия), что объясняется повреждением верхнего слоя образца.

Таким образом, можно сказать, что погрешность измерений толщины с использованием полуконтактного зонда и контактной методики составила 15 нм. В то же время, полуконтактный метод позволил без повреждения поверхности исследуемого образца получить четкое изображение и корректно оценить глубину царапины.



**Рисунок 3** – Оптические микрофотографии царапины на пленке после сканирования а) в полуконтакте; б) в контакте



**Рисунок 4** – Профиль поперечного сечения АСМ скана царапины на углеродной пленке

### Заключение

При выборе метода сканирования в атомно-силовой микроскопии всегда необходимо учитывать множество факторов – в первую очередь, это особенности образца и информация, которую необходимо извлечь в результате измерений. Если образец достаточно жесткий и необходимо провести точные измерения, то рекомендуется использовать мягкий зонд с длинной балкой в контакте. В случае «сложных» образцов – мягких, с сильно развитой поверхностью и плохой адгезией, применяется режим полуконтакта.

В данной работе пленка аморфного углерода, модифицированного атомами серебра, исследовалась двумя методами. В результате экспериментов, были подобраны оптимальные условия для изучения особенностей поверхности пленки и измерения ее толщины.

### Литература

- 1 General tutorial: Atomic force microscopy. [www.pacificnanotech.com](http://www.pacificnanotech.com)
- 2 Миронов В.Л. Основы сканирующей зондовой микроскопии. – РАН, г.Нижний Новгород, 2004. – 114 с.

### References

- 1 General tutorial: Atomic force microscopy. [www.pacificnanotech.com](http://www.pacificnanotech.com)
- 2 V.L. Mironov Osnovy skaniruyushchey zondovoy mikroskopii. – RAN, g.Nizhniy Novgorod, 2004. – 114 s. (in russ).

3-бөлім  
**ЯДРО ЖӘНЕ ЭЛЕМЕНТАР  
БӨЛШЕКТЕР ФИЗИКАСЫ**

---

Раздел 3  
**ФИЗИКА ЯДРА И  
ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ**

---

Section 3  
**NUCLEAR AND ELEMENTARY  
PARTICLE PHYSICS**

Жусупов М.А., Ибраева Е.Т.,  
Кабатаева Р.С.,  
Жаксыбекова К.А.,  
Темирбаев Д., Кажыкенов Ш.

**Упругое рассеяние протонов на  
ядрах  $^{13}\text{C}$  и  $^{15}\text{C}$  в  
дифракционной теории**

Zhusupov M.A., Ibrayeva Ye.T.,  
Kabatayeva R.S.,  
Zhaksybekova K.A.,  
Temirbayev D., Kazhykenov Sh.

**Elastic proton scattering  
on  $^{13}\text{C}$  and  $^{15}\text{C}$  nuclei in the  
diffraction theory**

Жүсіпов М.А., Ибраева Е.Т.,  
Кабатаева Р.С.,  
Жаксыбекова К.А.,  
Темирбаев Д., Кажыкенов Ш.

**Дифракциялық теория  
шеңберінде протондардың  
 $^{13}\text{C}$  ЖӘНЕ  $^{15}\text{C}$  ядроларындағы  
серпінді шашырауы**

В настоящей статье рассчитываются дифференциальные поперечные сечения рассеяния протонов на изотопах  $^{13}\text{C}$  и  $^{15}\text{C}$  при энергии 1 ГэВ с волновыми функциями модели оболочек в рамках теории Глаубера. В операторе многократного рассеяния были учтены однократные, двукратные и трекратные столкновения. Были оценены роль каждого члена в ряде и их интерференция в дифференциальном поперечном сечении. Показано, что для описания сечений в широком диапазоне углов/переданного импульса необходимо рассматривать не только столкновения первого порядка, но и столкновения более высоких порядков. Рассчитав вклад в дифференциальное сечение от первых трех членов ряда многократного рассеяния, авторы показали, что однократные соударения доминируют при самых малых углах рассеяния, до  $\theta < 12^\circ$ , двукратные – в области второго максимума в сечении  $20^\circ > \theta > 12^\circ$ , трекратные – в области третьего максимума при  $\theta < 20^\circ$ . В точках пересечения разных кратностей рассеяния в дифференциальных сечениях появляются характерные интерференционные минимумы поскольку ряд многократного рассеяния знакопеременный и перекрестные члены вычитаются из общей суммы.

**Ключевые слова:** дифракционная теория Глаубера, многократное рассеяние, рассеяние протонов, изотопы углерода, упругое рассеяние.

There is a calculation of the differential cross sections of proton scattering on  $^{13}\text{C}$  and  $^{15}\text{C}$  nuclei at energy of 1 GeV with the shell model wave functions in the framework of the Glauber theory in the study. The single, double and triple collisions have been taken into account in the multiple scattering operator. The role of each term of the series and their interference in the differential cross section have been estimated. It is shown that for a description of the cross sections in a wide angle/momentum transfer range it is necessary to consider not only the first, but the higher scattering orders. Having calculated the contribution into the differential cross sections from the first three terms of the series of multiple scattering, the authors showed that the single scattering dominates at the very small angles (until 12 degrees), double – in the range of the second maximum (from 12 to 20 degrees), triple – in the range of the third maximum at  $20^\circ$  and more degrees. In the points of intersection of the different orders in the differential cross sections there appear the typical interference minimums since the series of multiple scattering is a sign-alternating one and the cross terms are subtracted from the total sum.

**Key words:** Glauber diffraction theory, multiple scattering, proton scattering, carbon isotopes, elastic scattering.

Бұл мақалада протондардың  $^{13}\text{C}$  және  $^{15}\text{C}$  изотоптарында шашырау дифференциалдық көлденең қималары есептелді, ядролардың толқындық функциялары қабықшалар моделінде алынды, Глаубер теориясының шеңберінде. Көп реттік шашырау операторында бірреттік, екіреттік және үшреттік соқтығысулар ескерілді. Қатардағы әр мүшенің ролі және дифференциалдық қимадағы интерференциялары бағаланды. Қималарды кең бұрыштық/берілген импульс диапазонында сипаттау үшін тек гана бір реттік, бірақ сонымен қатар жоғары реттік соқтығысуларды қарастыру керек. Көпреттік шашырау қатарындағы бірінші үш мүшесінің үлесін есептеп, бірреттік шашырау кіші бұрыштар, екіреттік шашырау ортанғы бұраштыр, ал үшреттік шашырау үлкенірек бұрыштарда рольдерін маңызды екені көрсетілді. Шашыраудың әр түрлі реттерінің қиылысу нүктелерінде дифференциалдық қималарында интерференциялық минимумдар пайда болады, себебі көпреттік шашырау қатарының таңбасы өзгеріп тұрады және қиылысқан мүшелер толық суммадан алынады.

**Түйін сөздер:** Глаубер дифракциялық теориясы, көп реттік шашырау, протондардың шашырауы, көміртегі изотоптары, серпінді шашырау.

## УПРУГОЕ РАССЕЯНИЕ ПРОТОНОВ НА ЯДРАХ <sup>13</sup>C И <sup>15</sup>C В ДИФРАКЦИОННОЙ ТЕОРИИ

### Введение

В настоящее время теория многократного рассеяния Глаубера является наиболее обоснованной теорией в ядерной физике. Она позволяет получить амплитуду рассеяния нуклона на ядре как сумму амплитуд рассеяния на отдельных нуклонах ядра. Последние находятся из экспериментальных данных по нуклон-нуклонному рассеянию. В теории последовательно учитываются рассеяния различной кратности: однократные, двукратные и т.д., а также эффекты, связанные с интерференцией амплитуд разной кратности.

В модели оболочек структура основных состояний ядер  $C^{13}$  и  $C^{15}$  различна [1]. Если основное состояние ядра  $C^{13}$  имеет конфигурацию  $| (1s)^4 (1p)^9: J^\pi, T = 1/2^-, 1/2 >$ , то ядро  $C^{15}$  в основном состоянии есть  $| (1s)^4 (1p)^{10} 2s_{1/2}: J^\pi, T = 1/2^+, 3/2 >$ . Структура  $C^{15}$  в основном состоянии близка к структуре возбужденного состояния в ядре  $C^{13}$  с  $J^\pi = 1/2^+$  при  $E \sim 4$  МэВ и имеет вид  $| (1s)^4 (1p)^8 2s_{1/2}: J^\pi, T = 1/2^+, 1/2 >$ .

Целью настоящей работы является «микроскопический» расчет и анализ дифференциальных поперечных сечений рассеяния протонов на ядрах  $^{13}C$  и  $^{15}C$  в рамках глауберовской теории с волновыми функциями в модели оболочек при энергии 1 ГэВ, а также исследование интерференционных эффектов в глауберовском операторе многократного рассеяния.

### Краткий формализм

В глауберовской теории дифракционного рассеяния вычислены матричные элементы  $p^{13}C$  - рассеяния при энергии 1 ГэВ. Аналогичный расчет для  $p^{15}C$  - рассеяния проведен в нашей работе [2]. Входными параметрами теории являются волновые функции и параметры протон-нуклонных амплитуд, извлекаемые обычно из независимых экспериментов.

Волновая функция в модели оболочек для ядра  $^{13}\text{C}$  представлена конфигурацией:  $|(1s)^4(1p)^9\rangle$  для основного состояния [1].

Оболочечную волновую функцию представим в виде

$$\Psi_{i,f}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{13}) = |(1s)^4(1p)^9\rangle = \Psi_{n_0 l_0 m_0}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_4) \Psi_{n_i l_i m_i}(\vec{r}_5, \dots, \vec{r}_{13}), \quad (1)$$

где  $n_i l_i m_i$  – квантовые числа соответствующей оболочки ( $n_0 = 0, l_0 = 0, m_0 = 0; n_i = 1, l_i = 1, m_i = 0, \pm 1$ ). Каждая функция есть произведение

одночастичных  $\Psi_{nlm}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots) = \prod_i \Psi_{nlm}(\vec{r}_i)$ .

Матричный элемент (амплитуда)

$$M_{if}(\vec{q}) = \frac{ik}{2\pi} \int d^2\vec{\rho} \exp(i\vec{q}\vec{\rho}) \langle \Psi_f^{JM_f} | \Omega | \Psi_i^{JM_i} \rangle, \quad (2)$$

$\vec{q}$  – переданный в реакции импульс:

$$\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}', \quad (3)$$

$\vec{k}, \vec{k}'$  – импульсы налетающего и вылетевшего протона. В случае упругого рассеяния  $|\vec{k}| = |\vec{k}'|$  и импульс  $q$  равен:

$$q = 2k \sin \frac{\theta}{2}, \quad k = \sqrt{\varepsilon^2 - m^2}, \quad (4)$$

Оператор многократного рассеяния:

$$\Omega = 1 - \prod_{v=1}^A (1 - \omega_v(\vec{\rho} - \vec{\rho}_v)) = \sum_{v=1}^{13} \omega_v - \sum_{v\langle\mu=1} \omega_v \omega_\mu + \sum_{v\langle\mu\langle\eta=1} \omega_v \omega_\mu \omega_\eta - \dots (-1)^{12} \omega_1 \omega_2 \dots \omega_A \quad (5)$$

Ограничившись трехкратными соударениями, подставив оператор в формулу (2) и проинтегрировав его по  $d\vec{\rho}, d\vec{q}_i, \dots, d\vec{q}_k$ , получим

$$M_{if}^{(1)}(\vec{q}) = \frac{ik}{2\pi} \left\langle \prod_{i=1}^4 \Psi_{000}(\vec{r}_i) \prod_{j=5}^{13} \Psi_{11m}(\vec{r}_j) \left| \sum_{i=1}^4 \tilde{\omega}_i + \sum_{j=5}^{13} \tilde{\omega}_j \right| \prod_{i=1}^4 \Psi_{000}(\vec{r}_i) \prod_{j=5}^{13} \Psi_{11m}(\vec{r}_j) \right\rangle \quad (14)$$

$$\tilde{\Omega} = \tilde{\Omega}^{(1)} - \tilde{\Omega}^{(2)} + \tilde{\Omega}^{(3)} = \frac{2\pi}{ik} f_{pN}(q) \sum_{i=1}^A \tilde{\omega}_i - \left( \frac{2\pi}{ik} f_{pN} \left( \frac{q}{2} \right) \right)^2 \sum_{i\langle j=1}^A \tilde{\omega}_i \tilde{\omega}_j + \left( \frac{2\pi}{ik} f_{pN} \left( \frac{q}{3} \right) \right)^3 \sum_{i\langle j\langle k=1}^A \tilde{\omega}_i \tilde{\omega}_j \tilde{\omega}_k - \dots \quad (6)$$

Знак «тильда» над операторами означает проведенные интегрирования.

$$\sum_{i=1}^{13} \tilde{\omega}_i = \sum_{i=1}^{13} \exp(i\vec{q}\vec{\rho}_i), \quad (7)$$

$$\sum_{i=1}^{13} \tilde{\omega}_i \tilde{\omega}_j = \sum_{i\langle j=1}^{13} \exp\left(i\frac{\vec{q}}{2}(\vec{\rho}_i + \vec{\rho}_j)\right) \delta(\vec{\rho}_i - \vec{\rho}_j), \quad (8)$$

$$\sum_{i\langle j\langle k=1}^{13} \tilde{\omega}_i \tilde{\omega}_j \tilde{\omega}_k = \sum_{i\langle j=1}^{13} \exp\left(i\frac{\vec{q}}{3}(\vec{\rho}_i + \vec{\rho}_j + \vec{\rho}_k)\right) \times \delta(\vec{\rho}_i - \vec{\rho}_j) \delta\left(\vec{\rho}_k - \frac{1}{2}(\vec{\rho}_i + \vec{\rho}_j)\right) \quad (9)$$

Матричный элемент (2) в приближении трехкратного рассеяния:

$$M_{if}(\vec{q}) = M_{if}^{(1)}(\vec{q}) - M_{if}^{(2)}(\vec{q}) + M_{if}^{(3)}(\vec{q}), \quad (10)$$

где

$$M_{if}^{(1)}(\vec{q}) = \frac{ik}{2\pi} \left\langle \Psi_f \left| \sum_{v=1}^A \tilde{\omega}_v \right| \Psi_i \right\rangle, \quad (11)$$

$$M_{if}^{(2)}(\vec{q}) = \frac{ik}{2\pi} \left\langle \Psi_f \left| \sum_{v\langle\tau} \tilde{\omega}_v \tilde{\omega}_\tau \right| \Psi_i \right\rangle, \quad (12)$$

$$M_{if}^{(3)}(\vec{q}) = \frac{ik}{2\pi} \left\langle \Psi_f \left| \sum_{i\langle j\langle k}^{13} \tilde{\omega}_i \tilde{\omega}_j \tilde{\omega}_k \right| \Psi_i \right\rangle. \quad (13)$$

Матричный элемент однократного рассеяния:



$$M_{if}^{(1)}(\vec{q}) = 4 N_{11} M_{if}^{(1)-s}(\vec{q}) + 9 N_{00} M_{if}^{(1)-p}(\vec{q}), \quad (15)$$

где

$$\begin{aligned} M_{if}^{(1)-s}(\vec{q}) &= \\ &= \frac{ik}{2\pi} \left\langle \prod_{i=1}^4 \Psi_{000}(\vec{r}_i) \left| \sum_{i=1}^4 \tilde{\omega}_i \left| \prod_{i=1}^4 \Psi_{000}(\vec{r}_i) \right. \right. \right\rangle, \quad (16) \\ &= \frac{ik}{2\pi} \int \prod_{i=1}^4 |\Psi_{000}(\vec{r}_i)|^2 \sum_{i=1}^4 \tilde{\omega}_i d\vec{r}_i \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} M_{if}^{(1)-p}(\vec{q}) &= \\ &= \frac{ik}{2\pi} \left\langle \prod_{i=5}^{13} \Psi_{11m}(\vec{r}_i) \left| \sum_{i=5}^{13} \tilde{\omega}_i \left| \prod_{i=5}^{13} \Psi_{11m}(\vec{r}_i) \right. \right. \right\rangle, \quad (17) \\ &= \frac{ik}{2\pi} \int \prod_{i=5}^{13} |\Psi_{11m}(\vec{r}_i)|^2 \sum_{i=5}^{13} \tilde{\omega}_i d\vec{r}_i \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} N_{00} &= \left\langle \prod_{i=1}^4 \Psi_{000}(\vec{r}_i) \left| \prod_{i=1}^4 \Psi_{000}(\vec{r}_i) \right. \right\rangle, \\ N_{11} &= \left\langle \prod_{i=5}^{13} \Psi_{11m}(\vec{r}_i) \left| \prod_{i=5}^{13} \Psi_{11m}(\vec{r}_i) \right. \right\rangle. \quad (18) \end{aligned}$$

$M_{if}^{(1)-s}(\vec{q})$  – рассеяние на нуклонах 1s-оболочки (4 чл.),  $M_{if}^{(1)-p}(\vec{q})$  – на нуклонах 1p-оболочки (9 чл.),  $N_{00}, N_{11}$  – нормировки волновых функций.

Вычисление этих матричных элементов с волновыми функциями в модели оболочек в сферической системе координат с заменой двумерного вектора  $\vec{\rho}$  на трехмерный  $\vec{r}$  и разложением  $\exp(i\vec{q}\vec{\rho}_i)$  в ряд по функциям Бесселя  $J_{\lambda+\frac{1}{2}}(qr)$  и сферическим гармоникам  $Y_{\lambda\mu}(\hat{q})$  приведет к следующему результату:

$$M_{if}^{(1)-s}(q) = 4N_{00}^{\frac{3}{4}} \sqrt{\frac{\pi}{2q}} \int_0^\infty |R_{00}(r)|^2 J_{\frac{1}{2}}(qr) r^{\frac{3}{2}} dr, \quad (19)$$

$$M^{(1)-p}(\vec{q}) = 10(N_{11m})^{\%0} \sqrt{\frac{\pi}{2q}} \sqrt{4\pi} \sum_{\lambda\mu m} (i)^\lambda \sqrt{2\lambda+1} B_{11}^{(\lambda)}(q) \langle \lambda 0 1 0 | 1 0 \rangle \langle \lambda \mu 1 m' | 1 m \rangle Y_{\lambda\mu}(\hat{q}), \quad (20)$$

где

$$B_{11}^{(\lambda)}(q) = \int_0^\infty |R_{11}(r)|^2 J_{\lambda+\frac{1}{2}}(qr) r^{\frac{3}{2}} dr. \quad (21)$$

Радиальные волновые функции

$$R_{00} = C_{00} \exp\left(-\frac{r^2}{2r_0^2}\right), \quad C_{00} = \frac{2}{\pi^{\frac{1}{4}} r_0^{\frac{3}{2}}}, \quad (22)$$

$$R_{11} = C_{11} \frac{r}{r_0} \exp\left(-\frac{r^2}{2r_0^2}\right), \quad C_{11} = \sqrt{\frac{2}{3}} C_{00}. \quad (23)$$

Здесь  $r_0$  связан с осцилляторным параметром  $\hbar\omega$  соотношением

$$r_0^2 = \frac{\hbar}{m\omega} = \frac{(\hbar c)^2}{mc^2 \hbar\omega} = \frac{(1.97 \cdot 10^{-11} \text{ МэВ} \cdot \text{см})^2}{940 \text{ МэВ} \cdot 14 \text{ МэВ}}.$$

Для ядер 1p-оболочки  $\hbar\omega = 13,8$  МэВ [3].

Матричный элемент двукратного рассеяния

$$M_{if}^{(2)}(\mathbf{q}) = \frac{ik}{2\pi} \left\langle \prod_{i=1}^4 \Psi_{000}(\vec{r}_i) \prod_{j=5}^{13} \Psi_{11m}(\vec{r}_j) \left| \sum_{i<j=1}^4 \tilde{\omega}_i \tilde{\omega}_j + \sum_{i=1}^4 \tilde{\omega}_i \sum_{j=5}^{13} \tilde{\omega}_j + \sum_{i=5}^{12} \tilde{\omega}_i \sum_{j=6}^{13} \tilde{\omega}_j \right. \prod_{i=1}^4 \Psi_{000}(\vec{r}_i) \prod_{j=5}^{13} \Psi_{11m'}(\vec{r}_j) \right. \right\rangle \quad (24)$$

$$M_{if}^{(2)}(\vec{q}) = 6M_{000}^{(2)-ss}(q) N_{11} + 36M_{0011}^{(2)-sp}(\vec{q}) + 36M_{11}^{(2)-pp}(\vec{q}) N_{00}, \quad (25)$$

$$M_{if}^{(2)-ss}(\vec{q}) = \frac{2\pi}{k} f_{pN}^2 \left(\frac{q}{2}\right) \left\langle \prod_{i=1}^4 \Psi_{000}(\vec{r}_i) \left| \sum_{i<j=1}^4 \tilde{\omega}_i \tilde{\omega}_j \right| \prod_{i=1}^4 \Psi_{000}(\vec{r}_i) \right\rangle =$$

$$= \frac{2\pi}{k} f_{pN}^2 \left(\frac{q}{2}\right) \int \prod_{i=1}^4 |\Psi_{000}(\vec{r}_i)|^2 \sum_{i<j=1}^4 \exp\left(i\frac{\vec{q}}{2}(\vec{r}_i + \vec{r}_j)\right) \delta(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \prod_{i=1}^4 d\vec{r}_i \quad (26)$$

$$M_{if}^{(2)-sp}(\vec{q}) = \frac{2\pi}{k} f_{pN}^2 \left(\frac{q}{2}\right) \left\langle \prod_{i=1}^4 \Psi_{000}(\vec{r}_i) \left| \sum_{i=1}^4 \tilde{\omega}_i \right| \prod_{i=1}^4 \Psi_{000}(\vec{r}_i) \right\rangle \left\langle \prod_{i=5}^{13} \Psi_{11m}(\vec{r}_i) \left| \sum_{j=5}^{13} \tilde{\omega}_j \right| \prod_{i=5}^{13} \Psi_{11m'}(\vec{r}_i) \right\rangle =$$

$$= \frac{2\pi}{k} f_{pN}^2 \left(\frac{q}{2}\right) (M^{(1)-s} + M^{(1)-p}) \quad (27)$$

$$M_{if}^{(2)-pp}(\vec{q}) = \frac{2\pi}{k} f_{pN}^2 \left(\frac{q}{2}\right) \left\langle \prod_{i=5}^{13} \Psi_{11m}(\vec{r}_i) \left| \sum_{i<j=5}^{13} \tilde{\omega}_i \tilde{\omega}_j \right| \prod_{i=5}^{13} \Psi_{11m'}(\vec{r}_i) \right\rangle =$$

$$= \frac{2\pi}{k} f_{pN}^2 \left(\frac{q}{2}\right) \int \prod_{i=5}^{13} |\Psi_{11m}(\vec{r}_i)|^2 \sum_{i<j=5}^{13} \exp\left(i\frac{\vec{q}}{2}(\vec{r}_i + \vec{r}_j)\right) \delta(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \prod_{i=5}^{13} d\vec{r}_i \quad (28)$$

где  $M_{if}^{(2)-ss}(\vec{q})$ ,  $M_{if}^{(2)-sp}(\vec{q})$ ,  $M_{if}^{(2)-pp}(\vec{q})$  – соударения протона с нуклонами на (1s), (1s, 1p), (1p)-оболочках. Обозначим  $C^{(2)} = \frac{2\pi}{k} f_{pN}^2 \left(\frac{q}{2}\right)$ .

Применив ту же технику, что при вычислении матричного элемента однократного рассеяния, окончательно получим

$$M_{if}^{(2)-ss}(q) = 4 \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{2q}} C^{(2)} \int_0^\infty |R_{00}(r)|^2 J_{1/2}(qr) r^{3/2} dr. \quad (29)$$

$$M_{if}^{(2)-pp} = 36 \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{2q}} C^{(2)} \sum_{\lambda\mu m} B_{11}^{(\lambda)}(q) F_{\lambda\mu}(\hat{q}), \quad (30)$$

где

$$B_{11}^{(\lambda)}(q) = \int_0^\infty |R_{11}(r)|^2 J_{\lambda+1/2}(qr) r^{3/2} dr, \quad (31)$$

$$F_{\lambda\mu}(\hat{q}) = \int Y_{1m}(\hat{r}) Y_{1m'}^*(\hat{r}) Y_{\lambda\mu}(\hat{r}) d\Omega_r Y_{\lambda\mu}(\hat{q}) =$$

$$= \sum_{\lambda\mu m} \sqrt{\frac{(2\lambda+1)}{4\pi}} \langle 10\lambda 0 | 10 \rangle \langle 1m\lambda\mu | 1m' \rangle Y_{\lambda\mu}(\hat{q}) \quad (32)$$

Матричный элемент трехкратного рассеяния

$$M_{if}^{(3)}(\vec{q}) = \frac{ik}{2\pi} \left\langle \Psi_{000}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_4) \Psi_{11m_1}(\vec{r}_5, \dots, \vec{r}_{13}) \left| \tilde{\Omega}^{(3)} \right| \Psi_{000}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_4) \Psi_{11m_1}(\vec{r}_5, \dots, \vec{r}_{13}) \right\rangle \prod_{v=1}^4 d\vec{r} \quad (33)$$

Оператор трехкратного рассеяния

$$\tilde{\Omega}^{(3)} = \sum_{i<j<k} \tilde{\omega}_i \tilde{\omega}_j \tilde{\omega}_k = \left\{ \sum_{i<j<k=1}^4 \tilde{\omega}_i \tilde{\omega}_j \tilde{\omega}_k + \sum_{i<j=1}^4 \tilde{\omega}_i \tilde{\omega}_j \sum_{k=5}^{13} \tilde{\omega}_k + \sum_{v=1}^4 \tilde{\omega}_v \sum_{j<k=5}^{13} \tilde{\omega}_j \tilde{\omega}_k + \sum_{i<j<k=5}^{13} \tilde{\omega}_i \tilde{\omega}_j \tilde{\omega}_k \right\} \quad (34)$$

Такое представление оператора  $\tilde{\Omega}^{(3)}$  позволяет рассчитать вклад в дифференциальные сечения от перерассеяний на разных оболочках

$$M_{if}^{(3)}(q) = 4 M_{if}^{(3)-sss}(q) + 54 M_{if}^{(3)-ssp}(q) + 144 M_{if}^{(3)-spp}(q) + 84 M_{if}^{(3)-ppp}(q), \quad (35)$$

где

$$M_{if}^{(3)-sss}(q) = \left(\frac{2\pi}{ik_0}\right)^3 4f_{pN}^3\left(\frac{q}{3}\right) \left\langle \Psi_f \left| \sum_{i<j<k=1}^4 \tilde{\omega}_i \tilde{\omega}_j \tilde{\omega}_k \right| \Psi_i \right\rangle = \left(\frac{2\pi}{ik_0}\right)^3 4f_{pN}^3\left(\frac{q}{3}\right) \times \left\langle \prod_{i=1}^4 \Psi_{000}(\vec{r}_i) \left| \sum_{i<j<k=1}^4 \tilde{\omega}_i \tilde{\omega}_j \tilde{\omega}_k \right| \prod_{i=1}^4 \Psi_{000}(\vec{r}_i) \right\rangle \quad (36)$$

$$M_{if}^{(3)-ssp}(\vec{q}) = \left(\frac{2\pi}{ik_0}\right)^3 54f_{pN}^3\left(\frac{q}{3}\right) \left\langle \Psi_f \left| \sum_{\nu<\tau=1}^4 \tilde{\omega}_\nu \tilde{\omega}_\tau \sum_{\varepsilon=5}^{13} \tilde{\omega}_\varepsilon \right| \Psi_i \right\rangle = \left(\frac{2\pi}{ik_0}\right)^3 54f_{pN}^3\left(\frac{q}{3}\right) \times \left\langle \prod_{i=1}^4 \Psi_{000}(\vec{r}_i) \prod_{i=5}^{13} \Psi_{11m}(\vec{r}_i) \left| \sum_{\nu<\tau=1}^4 \tilde{\omega}_\nu \tilde{\omega}_\tau \sum_{\varepsilon=5}^{13} \tilde{\omega}_\varepsilon \right| \prod_{i=1}^4 \Psi_{000}(\vec{r}_i) \prod_{k=5}^{13} \Psi_{11m'}(\vec{r}_k) \right\rangle \quad (37)$$

$$M_{if}^{(3)-spp}(\vec{q}) = \left(\frac{2\pi}{ik_0}\right)^3 144f_{pN}^3\left(\frac{q}{3}\right) \left\langle \Psi_f \left| \sum_{\nu=1}^4 \tilde{\omega}_\nu \sum_{\tau<\varepsilon=5}^{13} \tilde{\omega}_\tau \tilde{\omega}_\varepsilon \right| \Psi_i \right\rangle = \left(\frac{2\pi}{ik_0}\right)^3 144f_{pN}^3\left(\frac{q}{3}\right) \times \left\langle \prod_{i=1}^4 \Psi_{000}(\vec{r}_i) \prod_{i=5}^{13} \Psi_{11m}(\vec{r}_i) \left| \sum_{\nu=1}^4 \tilde{\omega}_\nu \sum_{\tau<\varepsilon=5}^{13} \tilde{\omega}_\tau \tilde{\omega}_\varepsilon \right| \prod_{i=1}^4 \Psi_{000}(\vec{r}_i) \prod_{k=5}^{13} \Psi_{11m'}(\vec{r}_k) \right\rangle \quad (38)$$

$$M_{if}^{(3)-ppp}(\vec{q}) = \left(\frac{2\pi}{ik_0}\right)^3 84f_{pN}^3\left(\frac{q}{3}\right) \left\langle \Psi_f \left| \sum_{\nu<\tau<\varepsilon=5}^{13} \tilde{\omega}_\nu \tilde{\omega}_\tau \tilde{\omega}_\varepsilon \right| \Psi_i \right\rangle = \left(\frac{2\pi}{ik_0}\right)^3 84f_{pN}^3\left(\frac{q}{3}\right) \times \left\langle \prod_{i=5}^{13} \Psi_{11m}(\vec{r}_i) \left| \sum_{\nu<\tau<\varepsilon=5}^{13} \tilde{\omega}_\nu \tilde{\omega}_\tau \tilde{\omega}_\varepsilon \right| \prod_{k=5}^{13} \Psi_{11m'}(\vec{r}_k) \right\rangle \quad (39)$$

Верхние буквенные индексы обозначают оболочки. Коэффициенты перед амплитудами показывают, сколько трехкратных перерассейаний испытает протон с нуклонами из разных оболочек.

После разделения переменных и интегрирования в сферической системе координат получим окончательные выражения для матричных элементов трехкратных соударений:

$$M_{if}^{(3)-sss}(\vec{q}) = D_1(q) \int \exp(-3r^2/r_0^2) J_{\lambda/2}(qr) r^{\lambda/2} dr, \quad (40)$$

$$D_1(q) = F(q) \frac{4C_{00}^2}{2^2 \pi^{3/2}},$$

$$F(q) = \left(\frac{2\pi}{ik_0}\right)^3 f_{pN}^3\left(\frac{q}{3}\right) \frac{1}{\sqrt{2q}},$$

$$M_{if}^{(3)-ssp}(\vec{q}) = D_2(q) \sum_{\lambda\mu m m'} (i)^\lambda \sqrt{(2\lambda+1)} \langle \lambda 0 1 0 | 1 0 \rangle \langle \lambda \mu 1 m | 1 m' \rangle Y_{\lambda\mu}(\Omega_q) \times \int \exp(-3r^2/r_0^2) J_{\lambda+1/2}(qr) r^{\lambda+1/2} dr, \quad (41)$$

$$D_2(q) = F(q) \frac{54 C_{00}^2 C_{11}^2}{2^3 \pi r_0^2},$$

$$M_{if}^{(3)-spp}(\vec{q}) = D_3(q) \sum_{\lambda\mu mm'} \sum_{LML'M'} (i)^\lambda (-1)^{m'} \sqrt{(2\lambda+1)} \langle 1010|L'0\rangle \langle L'010|L0\rangle \langle \lambda 0 L 0|10\rangle \times \langle 1m_1 1m_2|L'M'\rangle \langle L'M'1-m'_1|LM\rangle \langle \lambda\mu LM|1m'_1\rangle Y_{\lambda\mu}(\Omega_q) \int \exp(-3r^2/r_0^2) J_{\lambda+\frac{1}{2}}(qr) r^{\frac{1}{2}} dr, \quad (42)$$

$$D_3(q) = F(q) \frac{144 C_{00}^2 C_{11}^2}{2\pi r_0^4},$$

$$M_{if}^{(3)-ppp}(\vec{q}) = D_4(q) \sum_{\lambda\mu mm'} \sum_{LML'M'} \sum_{KNK'N'} (i)^\lambda (-1)^{m'_1+m'_2+m'_3+N} \frac{\sqrt{(2\lambda+1)}}{(2K+1)} \langle 1010|L'0\rangle \langle L'010|L0\rangle \times \langle 1010|K'0\rangle \langle K'010|K0\rangle \langle 1m_1 1m_2|L'M'\rangle \langle L'M'1-m'_1|LM\rangle \langle 1m'_3 1-m'_2|K'N'\rangle \langle K'N'1-m'_3|KN\rangle \times \langle \lambda 0 L 0|K0\rangle \langle \lambda\mu LM|K-N\rangle Y_{\lambda\mu}(\Omega_q) \int \exp(-3r^2/r_0^2) J_{\lambda+\frac{1}{2}}(qr) r^{\frac{1}{2}} dr, \quad (43)$$

$$D_4(q) = F(q) \frac{84 \cdot 3^3 C_{11}^2}{2^3 \pi^2 r_0^6}.$$

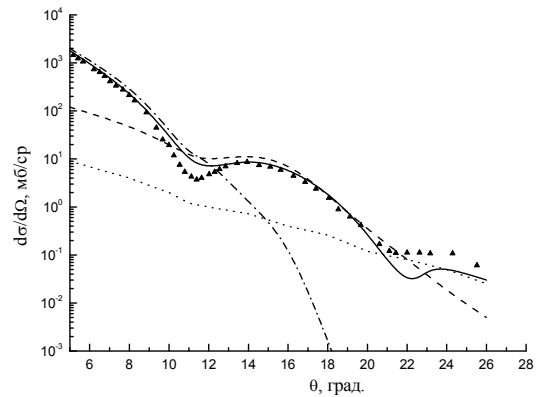
$C_{00}$ ,  $C_{11}$  – нормировочные коэффициенты радиальных волновых функций, формулы (5), (6).

### Анализ результатов

Проведен расчет дифференциальных сечений рассеяния протонов на ядрах  $^{13}\text{C}$  и  $^{15}\text{C}$  при энергии 1 ГэВ в глауберовской теории. В операторе многократного рассеяния учитывались одно-, двух- и трехкратные соударения

На рис. 1 приведены дифференциальные сечения упругого  $p^{13}\text{C}$ -рассеяния при  $E = 1.0$  ГэВ с учетом одно- (штрих-пунктир), двух- (штриховая), трехкратных (точки) соударений и суммарное сечение (сплошная кривая). Экспериментальные данные из [4]. Из рисунков видно, что при малых углах доминирует однократное рассеяние, по мере увеличения угла однократное быстро уменьшается, с ним сравнивается двукратное, и им определяется поведение сечения при промежуточных углах. При дальнейшем увеличении угла, когда сечения двукратных соударений уменьшаются, начинают играть роль трехкратные соударения, они и описывают поведение сечения. В точках равенства парциальных сечений возникают минимумы, поскольку ряд многократного рассеяния знакопеременный. При энергии 1 ГэВ преимущественный вклад однократных столкновений наблюдается только до углов  $11^\circ$ , двукратных – до  $21^\circ$ , трехкратных – свыше  $22^\circ$ . В суммарном дифференциальном

сечении присутствуют все кратности. Расчет правильно передает поведение дифференциального сечения, небольшие расхождения имеются в минимумах, поскольку эта область наиболее чувствительна к структуре волновой функции и к динамике взаимодействия.



**Рисунок 1** – Вклад в дифференциальное сечение  $p^{13}\text{C}$ -рассеяния: одно- (штрих-пунктир), двух- (пунктир), трех- (точки) кратные соударения и их сумма (сплошная кривая) при  $E = 1.0$  ГэВ

На рис. 2 показан вклад нескольких первых кратностей рассеяния в дифференциальное сечение  $p^{15}\text{C}$ -рассеяния. Каждый последующий член ряда (5) дает вклад на порядок меньше предыдущего. Как неоднократно указывалось в литературе [5], члены ряда многократного

рассеяния с увеличением угла рассеяния убывают неравномерно: однократное рассеяние убывает очень быстро и уже в области углов  $\theta \sim 14^\circ$  его вклад в дифференциальное сечение становится ничтожно малым; двукратное же рассеяние, будучи при малых углах  $\theta < 10^\circ$  гораздо меньше однократного, в области  $20^\circ > \theta > 12^\circ$  начинает доминировать и дает основной вклад в дифференциальное сечение; член трехкратного рассеяния, на два порядка меньше однократного при нулевом угле, сравнивается с двукратным при  $\theta \sim 20^\circ$  и дает основной вклад в сечение при  $\theta > 20^\circ$ . В областях, где кривые одно- двух- и трехкратных соударений пересекаются (т.е. там, где дифференциальные сечения сравниваются по абсолютной величине), возникают интерференционные минимумы, т.к. ряд (5) знакопеременный и при возведении матричного элемента в квадрат перекрестные члены вычитаются. Как видно из результата нашего расчета, чтобы описать поведение дифференциального сечения в широком угловом диапазоне, необходимо учитывать не только однократное, но и высшие кратности рассеяния. Этот же результат демонстрирует довольно быструю сходимость ряда многократного рассеяния (при заданной энергии 1 ГэВ/нуклон), когда достаточно ограничиться трехкратным рассеянием, т.к. в области малых углов рассеяния (где правомочен расчет по теории Глаубера) кратности выше третьей не будут давать заметного вклада в сечение.

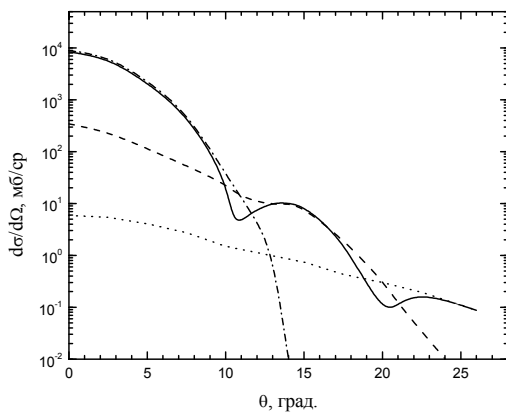


Рисунок 2 – То же, что на рис. 1 для  $p^{15}\text{C}$ -рассеяния

Структура основных состояний ядер  $\text{C}^{13}$  и  $\text{C}^{15}$  различная. Если основное состояние ядра  $\text{C}^{13}$  имеет конфигурацию  $|(1s)^4 (1p)^9: J^\pi, T = 1/2^-, 1/2$

$\rangle$ , то ядро  $\text{C}^{15}$  в основном состоянии есть  $|(1s)^4 (1p)^{10} 2s_{1/2}: J^\pi, T = 1/2^+, 3/2 \rangle$ . Структура  $\text{C}^{15}$  в основном состоянии близка к структуре возбужденного состояния в ядре  $\text{C}^{13}$  с  $J^\pi = 1/2^+$  при  $E \sim 4$  МэВ и имеет вид  $|(1s)^4 (1p)^8 2s_{1/2}: J^\pi, T = 1/2^+, 1/2 \rangle$ .

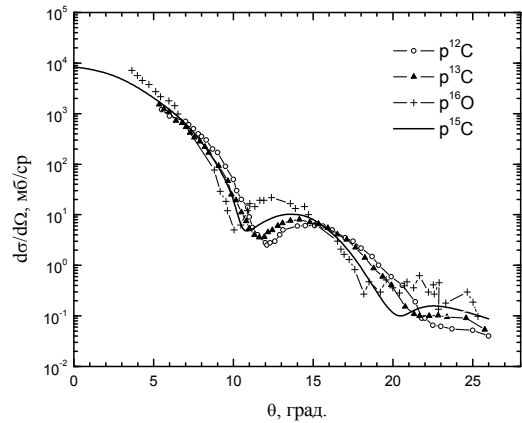


Рисунок 3 – Сравнение дифференциальных сечений на ядрах  $^{12}\text{C}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{15}\text{C}$ ,  $^{16}\text{O}$  при энергии  $E=1,0$  ГэВ/нуклон. Экспериментальные данные для  $^{12}\text{C}$ ,  $^{13}\text{C}$  взяты из [6], для  $^{16}\text{O}$  – из [7]

На рис. 3 продемонстрированы дифференциальные сечения на ядрах  $^{12}\text{C}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{15}\text{C}$ ,  $^{16}\text{O}$  при энергии  $E = 1.0$  ГэВ. Сравнение сечений показывает, что с увеличением числа нуклонов несколько увеличивается сечение при нулевом угле рассеяния, что отражает рост среднеквадратичного радиуса (от  $R_{rms} = 2,32$  фм для  $^{12}\text{C}$ , до  $R_{rms} = 3,42$  фм для  $^{16}\text{O}$ ) и минимум сечения смещается в область меньших углов рассеяния. Положение и величина минимумов отличаются значительно, поскольку рисунок по оси ординат приведен в логарифмическом масштабе. Результат, полученный нами для ядра  $^{15}\text{C}$ , не противоречит экспериментальным данным, полученным для других изотопов углерода и для ядра  $^{16}\text{O}$ .

## Выводы

В работе представлена техника расчета матричного элемента упругого рассеяния протонов на ядре  $^{13}\text{C}$  в рамках дифракционной глауберовской теории. Пренебрежение «малыми» ядерными импульсами  $\vec{Q}_i$  по сравнению с переданным  $\vec{q}$ , сделанное в ходе расчета, позволило

просуммировать весь ряд многократного рассеяния, а использование оболочечных волновых функций в базисе гармонического осциллятора обеспечило вычисление динамических интегралов (зависящих от оператора рассеяния в обкладках волновых функций) аналитически. Выведенная расчетная формула матричного элемента представляет собой произведение двух сомножителей, один из которых есть сумма ряда многократного рассеяния, другой отвечает за рассеяние на нуклонах из разных оболочек ядра  $^{15}\text{C}$ . Таким образом, стало возможным рассчитать вклад в дифференциальное сечение и от разных кратностей рассеяния, и от рассеяния на нуклонах, находящихся на разных оболочках.

Рассчитав вклад в дифференциальное сечение от первых трех членов ряда многократного рассеяния, мы показали, что однократные соударения доминируют при самых малых углах рассеяния, до  $\theta < 12^\circ$ , двукратные – в области вто-

рого максимума в сечении  $20^\circ > \theta > 12^\circ$ , трехкратные – в области третьего максимума при  $\theta > 20^\circ$ . В точках пересечения разных кратностей рассеяния в дифференциальных сечениях появляются характерные интерференционные минимумы поскольку ряд многократного рассеяния знакопеременный и перекрестные члены вычитаются из общей суммы.

Отсутствие экспериментальных данных для  $p^{15}\text{C}$ -рассеяния мотивировало нас провести сравнение дифференциальных сечений близких изотопов углерода  $^{12}\text{C}$  и  $^{13}\text{C}$  и ядра  $^{16}\text{O}$  при энергии 1 ГэВ, для которых данные имеются. Сечение для  $p^{15}\text{C}$ -рассеяния повторяет характерные особенности других, соглашаясь с ними и по абсолютной величине и по положению минимумов и максимумов. Из-за отсутствия экспериментальных данных для  $p^{15}\text{C}$ -рассеяния мы провели сравнение рассчитанных дифференциальных поперечных сечений для близких изотопов.

#### Литература

- 1 Бояркина А.Н. Структура ядер 1p-оболочки. – Москва: Изд. МГУ, 1973. – 62 с.
- 2 Ибраева Е.Т., Жусупов М.А., Имамбеков О., Нурбакова Г. Применение дифракционной теории к рассеянию протонов на ядрах  $^{14}\text{C}$  и  $^{15}\text{C}$  в инверсной кинематике // Изв.РАН. Сер. физ. – 2009. – т. 73, № 6 – с. 892-897; Bull of Russ. Acad. of Science: Phys. 2009, v. 73, № 6, pp. 845-851.
- 3 Неудачин В.Г., Смирнов Ю.Ф. Нуклонные ассоциации в легких ядрах. – М.: Наука. 1969. – 414 с.
- 4 Алхазов Г. Д. Распределение нейтронов в ядрах // ЯФ. – 1978. – Т. 42, № 11. – С. 2218-2233.
- 5 Glauber R.J. In Lectures in Theoretical Physics. – New York: Interscience, 1959. – Vol. 1. – P. 315.
- 6 Palevsky H. et al. Elastic Scattering of 1-BeV Protons from Hydrogen, Helium, Carbon, and Oxygen Nuclei // Phys. Rev. Lett. – 1967. – Vol. 18, No 26. – P. 1200-1204.
- 7 Алхазов Г.Д., Анисович В.В., Волковицкий П.Э. Дифракционное взаимодействие адронов с ядрами при высоких энергиях. – Л.: Наука, 1991. – 224 с.

#### References

- 1 A.V. Boyarkina Struktura yader 1p-obolochki. – Moskva: Izd. MGU, 1973. – 62 s. (in russ).
- 2 Ye.T. Ibrayeva, M.A. Zhusupov, O. Imambekov, G. Nurbakova, Izv.RAN. Ser.fiz., 73(6), 892-897, (2009). (in russ); Bull of Russ. Acad. of Science: Phys., 73(6), 845-851, (2009).
- 3 V.G. Neudatchin, Yu.F. Smirnov Nuklonnye assotsiatsii v lyogkih yadrah. M.: Nauka. 1969. 414 s. (in russ).
- 4 G.D. Alkhazov, YaF, 42(11), 2218-2233, (1978). (in russ).
- 5 R.J. Glauber, in Lectures in Theoretical Physics (Interscience, New York, 1959), 1, 315.
- 6 H. Palevsky et al., Phys. Rev. Lett., 18(26), 1200-1204, (1967).
- 7 G.D. Alkhazov, V.V. Anisovich, P.E. Volkovitsy, Dofraktsionnoe vzaimodeistvie adronov s yadrami pri vysokih energiyah. L.: Nauka, 1991, 224 s. (in russ).



Дүйсебаев А., Дүйсебаев Б.А.,  
Жолдыбаев Т.К., Садыков Б.М.,  
Исмаилов К.М., Насурлла М.,  
Бактораз А., Силыбаева А.,  
Исмаилов Н.

**Предравновесная эмиссия протонов и  $\alpha$ -частиц в реакциях на ядре  $^{59}\text{Co}$  при  $E_p = 30$  МэВ**

Duisebayev A., Duisebayev B.A.,  
Zholdybayev T.K., Sadykov B.M.,  
Ismailov K.M., Nassurlla M.,  
Baktoraz A., Silybayeva A.,  
Ismailov N.

**Preequilibrium emission of protons and  $\alpha$ -particles in reactions on  $^{59}\text{Co}$  nucleus at proton energy of 30 MeV**

Дүйсебаев Ә., Дүйсебаев Б.Ә.,  
Жолдыбаев Т.К., Садыков Б.М.,  
Исмаилов К.М., Насурлла М.,  
Бактораз А., Силыбаева А.,  
Исмаилов Н.

**$E_p = 30$  МэВ  $^{59}\text{Co}$  ядросындағы реакцияларда протондар мен  $\alpha$ -бөлшектердің тепе-теңдік алдындағы эмиссиясы**

Измерены дважды-дифференциальные сечения реакций  $(p, xp)$  и  $(p, \alpha)$  на ядре-мишени  $^{59}\text{Co}$  при энергии протонов  $E_p = 30$  МэВ, ускоренных на изохронном циклотроне У-150М Института ядерной физики РК. Измерения проводились в угловом диапазоне от  $30^\circ$  до  $135^\circ$  с шагом  $15^\circ$ . Объектом исследования выбран  $^{59}\text{Co}$ , являющийся кандидатом на конструкционный материал в ядерных установках. Из дважды-дифференциальных сечений определены экспериментальные интегральные и парциальные сечения исследованных реакций. Величина экспериментального парциального сечения реакции  $(p, xp)$  на ядре  $^{59}\text{Co}$  составила  $1002,0 \pm 1,5$  мб,  $(p, \alpha) - 57,0 \pm 0,5$  мб. Анализ экспериментальных результатов выполнен в рамках экситонной модели распада ядер с использованием расчетного кода PRECO-2006, описывающего переход возбужденной системы в равновесное состояние. Рассчитаны вклады в формирование интегральных сечений составных, предравновесных и прямых механизмов. Полученные результаты представляют интерес, как для фундаментальной ядерной физики, так и для различных прикладных областей, в частности, ядерной трансмутации долгоживущих радиоактивных отходов.

**Ключевые слова:** циклотрон, ядерные реакции, инклюзивные сечения реакций, предравновесный распад, составное ядро, экситонная модель.

Double differential cross sections of the reactions  $(p, xp)$  and  $(p, \alpha)$  on target nucleus  $^{59}\text{Co}$  with a proton accelerated by the isochronous cyclotron U-150M (Institute of Nuclear Physics of Republic of Kazakhstan) to the energy of  $E_p = 30$  MeV were measured. These measurements were performed in the angular range from  $30^\circ$  to  $135^\circ$  with the steps of  $15^\circ$ . The selected object of study  $^{59}\text{Co}$ , is a candidate for a structural material in nuclear plants. The experimental integral and partial cross-sections of the investigated reactions were defined from the double differential cross sections. The value of the experimental cross section of the partial reactions  $(p, xp)$  on  $^{59}\text{Co}$  nucleus was equal to  $1002.0 \pm 1.5$  mb,  $(p, \alpha) - 57.0 \pm 0.5$  Mb. The analysis of experimental results carried out within exciton model of nuclei decay using code PRECO-2006 that described the transition of the excited system to equilibrium. The contributions in the formation of the integral cross sections of compound, pre-equilibrium and direct mechanisms were estimated. The obtained results are of interest to both fundamental nuclear physics and different application areas, in particular, nuclear transmutation of long-lived radioactive wastes.

**Key words:** cyclotron, nuclear reactions, inclusive cross sections of reactions, pre-equilibrium decay, compound nucleus, exciton model.

ҚР Ядролық физика институтының У-150М изохронды циклотронында үдетілген  $E_p = 30$  МэВ протондар энергиясында  $^{59}\text{Co}$  ядро-нысанасында  $(p, xp)$  және  $(p, \alpha)$  реакциялардың екі мәрте -дифференциалдық қималары өлшенген. Өлшеулер  $15^\circ$  қадамымен  $30^\circ$  бастап  $135^\circ$  дейін бұрыштық ауқымында өткізілді. Зерттеу нысаны ретінде ядролық қондырғыларда конструкциялық материалға кандидат болып табылатын  $^{59}\text{Co}$  таңдалды. Екі мәрте-дифференциалдық қималардан зерттелген реакциялардың эксперименттік интегралдық және үлестік қималары анықталды.  $^{59}\text{Co}$  ядросындағы  $(p, xp)$  реакцияның эксперименттік үлестік қиманың шамасы  $1002,0 \pm 1,5$  мб,  $(p, \alpha) - 57,0 \pm 0,5$  мб. құрды. Эксперименттік нәтижелер талдауы қозған жүйенің тепе-теңдік күйге өтуін сипаттайтын PRECO-2006 есептік кодты пайдалана отырып, ядролар ыдырауының экситондық моделінің шеңберінде орындалды. Құрама, тепе-теңдік алды және тура механизмдердің интегралдық қималарының қалыптасуында үлестері есептелген. Алынған нәтижелер іргелі ядролық физика және де, әртүрлі қолданбалы салалар үшін, негізінен ұзақ ғұмырлы радиоактивті қалдықтардың ядролық трансмутациясы мүделлі болып табылды.

**Түйін сөздер:** циклотрон, ядролық реакциялар, реакцияның инклюзивтік қималары, тепе-теңдік алды шашырау, құрама ядро, экситондық модель.



**<sup>1</sup>Дуйсебаев А., <sup>1</sup>Дуйсебаев Б.А., <sup>1\*</sup>Жолдыбаев Т.К.,  
<sup>1</sup>Садыков Б.М., <sup>2</sup>Исмаилов К.М., <sup>1,3</sup>Насурлла М.,  
<sup>3</sup>Бактораз А., <sup>3</sup>Силыбаева А., <sup>4</sup>Исмаилов Н.**

<sup>1</sup>Институт ядерной физики МЭ РК, Республика Казахстан, г. Алматы

<sup>2</sup>Назарбаев Университет, Республика Казахстан, г. Алматы

<sup>3</sup>Казахский национальный университет имени аль-Фараби,  
Республика Казахстан, г. Алматы

<sup>4</sup>Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева,  
Республика Казахстан, г. Алматы

\*E-mail: zholdybayev@inp.kz

## **ПРЕДРАВНОВЕСНАЯ ЭМИССИЯ ПРОТОНОВ И $\alpha$ -ЧАСТИЦ В РЕАКЦИ- ЯХ НА ЯДРЕ $^{59}\text{Co}$ ПРИ $E_p = 30$ МЭВ**

### **Введение**

В последние годы, при обсуждении будущего глобальной энергетики важным пунктом является проблема эффективной утилизации отработавшего ядерного топлива. В качестве альтернативного и перспективного способа решения этой проблемы ведущие мировые державы начали серьезно рассматривать использование электроядерных систем (Accelerator Driven Systems – ADS в международной терминологии) [1-3]. Ключевой в физическом сценарии работы гибридных ядерных установок является проблема константного обеспечения, практически отсутствующая информация о сечениях ядерных реакций, образованных в реакциях с заряженными частицами и нейтронами в широком диапазоне энергий возбуждения и нуклонного состава.

Результаты, представленные в настоящей работе, являются продолжением исследований по определению дважды дифференциальных и интегральных сечений реакций, инициированных протонами с  $E_p = 30$  МэВ с образованием вторичных протонов и альфа-частиц на ряде конструктивных элементов ядерно-энергетических систем [4-6]. Выбор энергии протонов в 30 МэВ обусловлен тем, что при этой энергии открыто много каналов реакций, а полное сечение реакций для исследуемого ядра достигает своего максимума. Объектом исследования выбран  $^{59}\text{Co}$ , являющейся кандидатом на конструкционный материал в ядерных установках [7].

### **Экспериментальная часть**

Экспериментальные данные по дважды-дифференциальным сечениям реакций ( $p, xp$ ) и ( $p, \alpha$ ) на ядре  $^{59}\text{Co}$  при энергии падающих протонов 30 МэВ получены на выведенном пучке изохронного циклотрона Института ядерной физики [8]. Измерения выполнены в угловом диапазоне  $30 - 135^\circ$  с шагом  $15^\circ$ .

В качестве ядра-мишени использовалась самоподдерживающаяся фольга изотопа  $^{59}\text{Co}$ . Толщина определялась по изме-

нению потери энергии  $\alpha$ -частиц от радиоактивного источника  $^{226}\text{Ra}$  (в спектре которого есть пять  $\alpha$ -линий с энергиями 4.782, 5.305, 5.490, 6.002 и 7.687 МэВ) при прохождении через мишень и составила 4 мг/см<sup>2</sup>.

Электронная установка измерительного комплекса состояла из трех трактов:

1) мониторный, состоящий из сцинтилляционного счетчика, расположенного в плоскости реакции под углом 30° относительно падающего пучка;

2) цилиндр Фарадея – интегратор тока для измерений полного числа частиц, прошедших через мишень;

3) тракт поворотного детектора – телескопа, состоящего из пролетного счетчика  $\Delta E$  и счетчика полного поглощения  $E$ . Сигналы, вызванные прошедшей через оба детектора частицей, проходят спектрометрическую линейку и их дальнейшая обработка осуществляется системой двухмерного программируемого анализа [9].

Для измерения сечений ядерных реакций ( $p$ ,  $xp$ ) использовался телескоп, состоящий из пролетного  $\Delta E$  кремниевого детектора с толщиной 100 мкм и  $E$  детектора полного поглощения на основе сцинтиллятора (монокристалл цезия йодистого, активированных таллием) CsI(Tl) толщиной 2,5 см. Телесный угол телескопа составил  $\Omega = 2.62 \times 10^{-5}$  стерадиан. Для измерения реакций ( $p, \alpha$ ), телескоп состоял из пролетного  $\Delta E$  кремниевого детектора толщиной 25 мкм, и  $E$  кремниевого детектора полного поглощения толщиной 1 мм. Телесный угол телескопа составил  $\Omega = 5.34 \times 10^{-5}$  стерадиан. Энергетическая

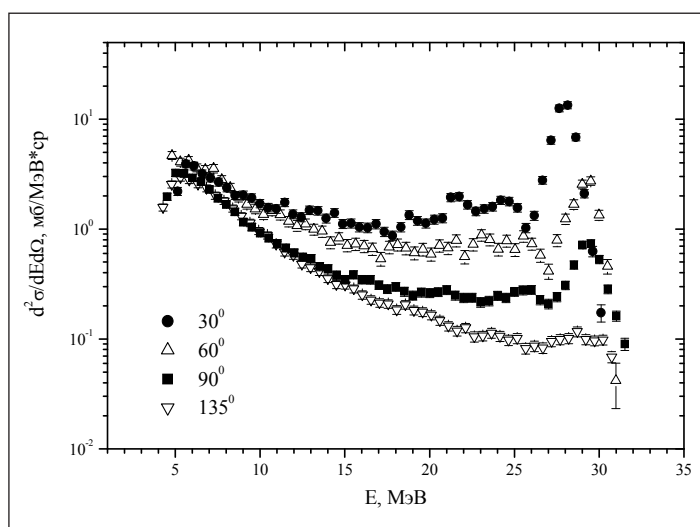
калибровка спектрометра проводилась по наблюдаемым уровням конечных ядер в исследуемых реакциях, а также из данных по рассеянию и реакциям на углеродной и полиэтиленовой мишенях.

Систематические ошибки измеренных сечений обусловлены, главным образом, погрешностями в определении толщины мишени (<5 %), калибровки интегратора тока (1 %) и телесного угла спектрометра (1,3 %). Энергия пучка ускоренных частиц измерялась с точностью 1,2 %. Величина отношения числа отсчетов монитора к интегратору сохранялась постоянной в пределах 1 %. «Физический нуль» устанавливался с точностью не хуже 0,5°, угол регистрации фиксировался с точностью 0,5°. Полная систематическая ошибка не превышала 10 %.

Статистическая ошибка, величина которой зависела от типа и энергии регистрируемых частиц, составляла для протонов 1 – 4 %, а для  $\alpha$ -частиц – 1 – 8 %.

Полученные дважды-дифференциальные сечения реакции ( $p$ ,  $xp$ ) и ( $p$ ,  $\alpha$ ) на ядре  $^{59}\text{Co}$ , представлены на рисунках 1 – 2.

Экспериментальные данные по дважды-дифференциальным сечениям реакции ( $p$ ,  $xp$ ) и ( $p$ ,  $\alpha$ ) на ядре  $^{59}\text{Co}$  при энергии протонов 30 МэВ проинтегрированы в измеренном угловом диапазоне. Полученные интегральные сечения, усредненные в диапазоне энергий 0,5 МэВ, представлены на рисунках 3 – 4. Величина экспериментального парциального сечения реакции ( $p, xp$ ) на ядре  $^{59}\text{Co}$  составила  $1002,0 \pm 1,5$  мб, ( $p, \alpha$ ) –  $57,0 \pm 0,5$  мб.



**Рисунок 1** – Угловые распределения экспериментальных дважды-дифференциальных сечений реакции  $^{59}\text{Co}(p, xp)$  при  $E_p = 30$  МэВ

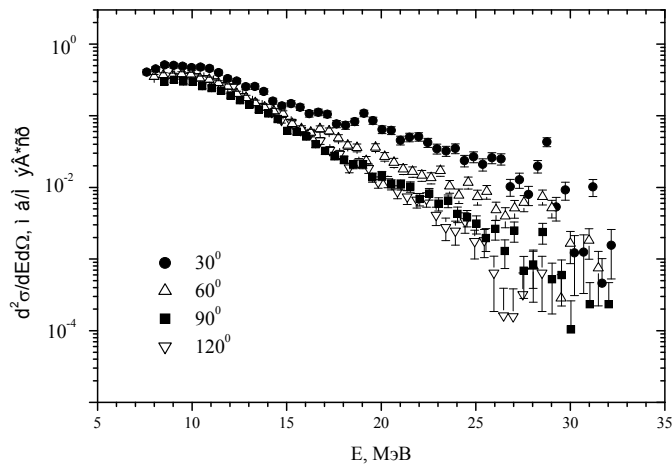


Рисунок 2 – Угловые распределения экспериментальных дважды-дифференциальных сечений реакции  $^{59}\text{Co}(p, \alpha)$  при  $E_p = 30$  МэВ

**Анализ данных**

Анализ экспериментальных результатов реакции  $^{59}\text{Co}(p, xp)$  и  $(p, \alpha)$  выполнен в рамках экситонной модели распада ядер [10], которая по своей сути является статистическим подходом, описывающим переход возбужденного ядра в равновесное состояние. В двухкомпонентной экситонной модели протонные и нейтронные степени свободы учитываются отдельно [11] и принимается, что ядро характеризуется параметрами  $p_\pi, h_\pi, p_\nu, h_\nu$ , где  $p$  и  $h$  обозначают частичные и дырочные, а  $\pi$  и  $\nu$  – протонные и нейтронные степени свободы, соответственно. Компаунд ядро формируется с частично-дырочной конфигурацией, которая учитывает только налетающие нуклоны как частичные степени свободы и не учитывает дырочные. Такая конфигурация обозначается как  $(p_\pi, h_\pi, p_\nu, h_\nu) = (Z_a, 0, N_a, 0)$ , где  $a$  относится к бомбардирующей частице. Разность между числом частиц и дырок в процессе перехода в равновесное состояние сохраняется. Расчеты плотности одночастичных состояний рассчитываются отдельно для протонов  $g_{\pi 0}$  и нейтронов  $g_{\nu 0}$ :

$$g_{\pi 0} = \frac{Z}{K_g}, \tag{1}$$

$$g_{\nu 0} = \frac{N}{K_g}, \tag{2}$$

где  $K_g$  – нормировочный коэффициент. Плотность частично-дырочных состояний [12]:

$$\omega_{ESM}(p, p_\pi, E) = \frac{(g_{\pi 0})^{n_\pi} (g_{\nu 0})^{n_\nu} (E - A(p, p_\pi, E))^{n-1}}{p_\pi! h_\pi! p_\nu! h_\nu! (n-1)!}, \tag{3}$$

где  $A(p, p_\pi, E)$  – поправка, учитывающая выполнение принципа запрета Паули. Эти плотности используются для вычисления вероятностей переходов, которые переводят ядро из одной частично-дырочной конфигурации в другую.

В силу предположения о малости остаточных двухчастичных взаимодействий для нахождения отнесенной к единице времени вероятности внутриядерных переходов  $\lambda$  используется первый порядок теории возмущения [13]:

$$\lambda = (2\pi / \hbar) \langle |M|^2 \rangle \omega, \tag{4}$$

где  $|M|^2$  – среднеквадратичный матричный элемент, определяющий интенсивность внутриядерных переходов, то есть переходов между состояниями с различным  $n$ , а  $\omega$  – плотность конечных состояний, реально достижимых при данном переходе. Предполагается, что матричные элементы имеют одинаковую формулу и отличаются только нормализующими коэффициентами  $K_{ij}$  [14]:

$$|M_{ij}|^2 = K_{ij} A_a g_0^{-3} \left( \frac{E}{3A_a} + 20.9 \right)^{-3}, \tag{5}$$

где  $A_a$  – масса налетающей частицы.

На любом этапе релаксации системы возможна эмиссия частиц типа  $b$  в канал с энергией

$\varepsilon$ . Скорость испускания частицы из этого состояния рассчитывается по формуле:

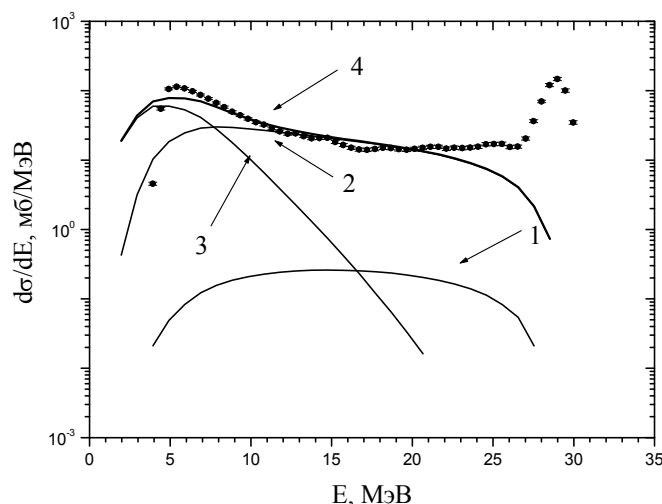
$$W_b(p, p_\pi, E, \varepsilon) = \frac{2s_b + 1}{\pi^2 \hbar^3} \mu_b \varepsilon \sigma_b(\varepsilon) \frac{\omega(p_\pi - Z_b, h_\pi, p_\nu - N_b, h_\nu, U)}{\omega(p_\pi, h_\pi, p_\nu, h_\nu, E)}, \quad (6)$$

где  $Z_b$  и  $N_b$  – число протонов и нейтронов вылетевшей частицы,  $s_b$  – ее спин, а  $i_b$  – ее масса. Величина  $\sigma_b(\varepsilon)$  – сечение инверсного процесса образования составного ядра,  $U$  – энергия возбуждения, определяемая как  $U = E - \varepsilon - B_b$ , где  $B_b$  – энергия связи испускаемой частицы.

Теоретические расчеты проведены в рамках компьютерного кода PRECO-2006 [15], оптимизированного для рассматриваемого случая. В качестве исходной бралась  $(p_\pi, h_\pi, p_\nu, h_\nu) = (2, 0, 1, 0)$  частично-дырочная конфигурация. Нормировочный коэффициент  $K_g$  принимался равным 15 МэВ. При параметризации квадрата матричных элементов использовались значения нормировочных констант:  $K_{\pi\pi} : K_{\pi\nu} : K_{\nu\nu} = 2200 : 900 : 900$  МэВ<sup>2</sup>. При определении  $\sigma_{a,pre}$  использовались параметры оптического потенциала Vecchetti-Greenlees [16] для протонов и Huizenga [17] для  $\alpha$ -частиц.

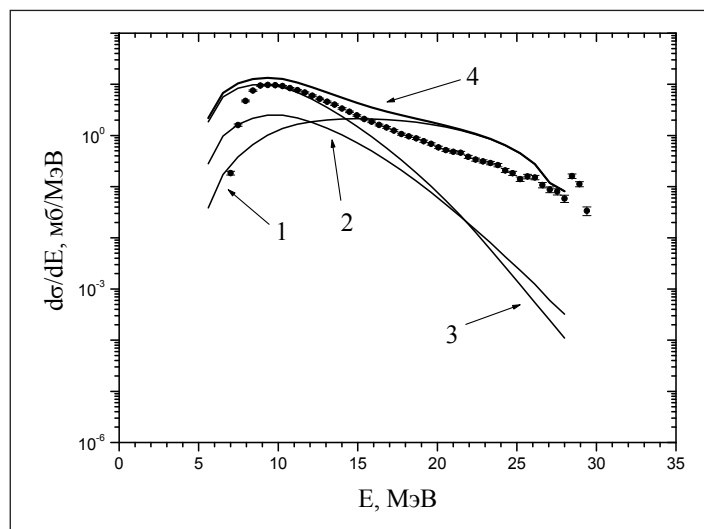
На рисунках 3 – 4 приведено сравнение экспериментальных и теоретических данных по интегральным сечениям реакций  $(p, xp)$  и  $(p, x\alpha)$  на ядре  $^{59}\text{Co}$  при  $E_p = 30$  МэВ. Получено удовлетворительное согласие экспериментальных и расчетных значений в области энергий, соответствующих предравновесному механизму. Установлены вклады механизмов ядерных реакций в формирование инклюзивных спектров, численные значения которых приведены в таблице.

Установлено, что интегральные сечения в реакциях  $(p, xp)$  и  $(p, x\alpha)$  на ядре  $^{59}\text{Co}$  в низкоэнергетической области формируются механизмом распада из составного ядра. Высокоэнергетическая область в случае реакции  $(p, xp)$  формируется преимущественно предравновесным способом. В случае реакции  $(p, x\alpha)$  основной вклад в сечение дают одноступенчатые прямые процессы.



Символы – эксперимент, линии – теоретические расчеты:  
 1 – одноступенчатые процессы, 2 – предравновесная компонента,  
 3 – эмиссия частиц из равновесного состояния,  
 4 – суммарное интегральное сечение.

**Рисунок 3** – Сравнение экспериментального интегрального сечения реакции  $^{59}\text{Co}(p, xp)$  с расчетами в рамках экситонной модели



Символы – эксперимент, линии – теоретические расчеты:  
 1 – одноступенчатые процессы, 2 – предравновесная компонента,  
 3 – эмиссия частиц из равновесного состояния,  
 4 – суммарное интегральное сечение.

**Рисунок 4** – Сравнение экспериментального интегрального сечения реакции  $^{59}\text{Co}(p, \alpha)$  с расчетами в рамках экситонной модели

**Таблица** – Вклады механизмов ядерных реакций в формирование интегральных спектров (p,xp) и (p, α) на ядре  $^{59}\text{Co}$  при  $E_p = 30$  МэВ

Реакция	Энергетический диапазон, МэВ	Механизмы ядерных реакций			
		прямой, мб	предравновесный, мб	равновесный, мб	сумма, мб
(p,xp)	2,0 – 28,5	4,4 (0,6%)	442,3 (55,2%)	354,3 (44,2%)	801,0 (100%)
(p,α)	5,6 – 29,9	29,2 (25,6%)	18,6 (16,4%)	66,1 (58,0%)	114,0 (100%)

### Заключение

Получены экспериментальные дважды дифференциальные спектры протонов и α-частиц в широком диапазоне энергий (от 4 до 30 МэВ) и углов  $30 - 135^\circ$  (с шагом  $15^\circ$ ) из реакций, инициированных протонами с энергией 30 МэВ на ядре  $^{59}\text{Co}$ . Определены экспериментальные интегральные и парциальные сечения исследованных реакций. Величина экспериментального парциального сечения реакции (p,xp) на ядре  $^{59}\text{Co}$  составила  $1002,0 \pm 1,5$  мб, (p, α) –  $57,0 \pm 0,5$  мб.

Выполнен теоретический анализ полученных экспериментальных инклюзивных сечений реакций (p,xp) и (p,α) на ядре  $^{59}\text{Co}$  при энергии налетающих протонов 30 МэВ на основе экситонной модели предравновесного распада.

Из сравнения экспериментальных и теоретически рассчитанных интегральных спектров следует, что основной вклад в формирование сечения реакций (p, xp) обусловлен предравновесным механизмом. Из рассмотрения вкладов механизмов, формирующих инклюзивные сечения реакции (p, α), следует, что образование α-частиц идет преимущественно через прямые одноступенчатые процессы, за исключением низкоэнергетического диапазона, где становится существенной эмиссия частиц из равновесного состояния.

Полученные экспериментальные результаты восполняют базу ядерных данных по сечениям реакций и могут быть использованы при конструировании гибридных ядерно-энергетических установок.

### Литература

- 1 Carminati F., Klapisch R., Revol J.P., Roche C., Rubio A., Rubbia C. An energy amplifier for cleaner and inexhaustible nuclear energy production driven by a particle beam accelerator // Tech. Rep. CERN-AT-93-47-ET, CERN. – 1993.
- 2 Bowman C.D., Arthur E.D., Lisowski P.W. et al. Nuclear energy generation and waste transmutation using an accelerator-driven intense thermal neutron source // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. – 1992. – Vol.A.320. – P.336-367.
- 3 it Abderrahim H.A, Kupschus P, Malambu E. et al. MYRRHA: A multipurpose accelerator driven system for research & development// Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. – 2001. – Vol.A.463. – P.487-494.
- 4 Duisebayev A., Ismailov K.M., Bostosun I. Inclusive spectra of (p,xp) and (p,xd) reactions on  $^{90,92}\text{Zr}$  and  $^{92}\text{Mo}$  nuclei at  $E_p = 30.3$  MeV // Phys. Rev. – 2003. – Vol.C67. – P.044608-1 – 044608-8.
- 5 Дуйсебаев А., Исмаилов К.М. Компоненты сечений инклюзивных спектров реакций (p,xp), (p,xd) и (p,x $\alpha$ ) на ядрах  $^{90,92}\text{Zr}$ ,  $^{92}\text{Mo}$  и  $^{56}\text{Fe}$  // Вестник КазНУ, сер.физ. – 2006. – №2(22). – С.124-132.
- 6 Duisebayev A., Duisebayev B.A., Zholdybayev T.K., Sadykov B.M. and Ismailov K.M. Inclusive Spectra of Protons and  $\alpha$ -Particles from Reactions Induced by Protons with an Energy of 30.0 MeV on the  $^{209}\text{Bi}$  Nucleus // Bulletin of the Russian Academy of Sciences. Physics. – 2014. – Vol.78, № 7. – P.601-604.
- 7 Ikeda Y. Nuclear data relevant to accelerator driven system // Journal of Nuclear Science and Technology. – 2002. – Suppl. 2. – P. 13.
- 8 Арзуманов А.А., Неменов Л.М., Анисимов О.И. и др. Изохронный циклотрон с регулируемой энергией ионов // Изв. АН КазССР, сер. физ.-мат. – 1973. – № 4. – С.6-15.
- 9 Буртебаев Н.Т. и др. Система многомерного анализа для исследования ядерных реакций на циклотроне ИЯФ АН КазССР // Изв. АН КазССР, сер. физ.-мат. – 1975. – №2. – С.65-68.
- 10 Griffin J. J. Statistical model of intermediate structure // Phys. Rev. Lett. – 1966. – №9. – P.478-481.
- 11 Kalbach C. Two-component exciton model: Basic formalism away from shell closures // Phys. Rev. – 1986. – Vol.C33. – P.818-833.
- 12 Williams F.C. Particle-hole state density in the uniform spacing model // Nucl. Phys. – 1971. – Vol.A166. – P.231-240.
- 13 Williams F.C. Intermediate state transitions in the Griffin model // Phys. Lett. – 1970. – Vol.B31, №4. – P.184-186.
- 14 Kalbach C. Preequilibrium reactions with complex particle channels // Phys. Rev. – 2005. – Vol.C71. – P.034606-1 □ 034606-23.
- 15 Kalbach C., PRECO-2006: Program for Calculating Pre-equilibrium and Direct Reaction Double Differential Cross-Sections // LA-10248-MS, February 2006.
- 16 Becchetti F.D., Greenlees G.W. Nucleon-nucleus optical-model parameters, A340,  $E < 50$  MeV // Phys.Rev. – 1969. – Vol.C 182. – P.1190-1209.
- 17 Huizenga J.R., Igo G. Theoretical reaction cross sections for alpha particles with an optical model. // Nuclear Physics. – 1969. – Vol.29. – P. 462-473.

### References

- 1 F. Carminati, R. Klapisch, J.P. Revol, C. Roche, A. Rubio, C. Rubbia An energy amplifier for cleaner and inexhaustible nuclear energy production driven by a particle beam accelerator, Tech. Rep. CERN-AT-93-47-ET, CERN, 1993.
- 2 C.D. Bowman, E.D. Arthur, P.W. Lisowski et al., Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, A.320, 336-367, (1992).
- 3 H.A. it Abderrahim, P. Kupschus, E. Malambu et al., Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A.463, 487-494, (2001).
- 4 A. Duisebayev, K.M. Ismailov, I. Bostosun, Phys. Rev. C67, 044608(8), (2003).
- 5 A. Duisebayev, K. Ismailov, Vestnik KazNU, ser.fiz., 2(22), 124-132, (2006). (in russ).
- 6 A. Duisebayev, B.A. Duisebayev, T.K. Zholdybayev, B.M. Sadykov and K.M. Ismailov, Bulletin of the Russian Academy of Sciences. Physics, 78(7), 601-604, (2014).
- 7 Y. Ikeda, Journal of Nuclear Science and Technology, Suppl. 2, 13, (2002).
- 8 A.A. Arzumanov, L.M. Nemenov, O.I. Anisimov i dr., Izv. AN KazSSR, ser. fiz.-mat., 4, 6-15, (1973). (in russ).
- 9 N.T. Burtebayev i dr., Izv. AN KazSSR, ser. fiz.-mat., 2, 65-68, (1975). (in russ).
- 10 J.J. Griffin, Phys. Rev. Lett. 9, 478-481, (1966).
- 11 C. Kalbach, Phys. Rev. C33, 818-833, (1986).
- 12 F.C. Williams, Nucl. Phys. A166, 231-240, (1971).
- 13 F.C. Williams, Phys. Lett. B31, 4, 184-186, (1970).
- 14 C. Kalbach, Phys. Rev. C71, 034606(23), (2005).
- 15 C. Kalbach, PRECO-2006: Program for Calculating Pre-equilibrium and Direct Reaction Double Differential Cross-Sections, LA-10248-MS, February 2006.
- 16 F.D. Becchetti, G.W. Greenlees, Phys.Rev. C 182, 1190-1209, (1969).
- 17 J.R. Huizenga, G. Igo, Nuclear Physics, 29, 462-473, (1969).



Джунушалиев В.Д.,  
Проценко Н.А.

**Движение цветных  
заряженных частиц в SU(3)  
неабелевой модели темной  
материи**

В статье предлагается метод экспериментальной проверки одной из моделей темной материи, в которой темной материей является классическое неабелево SU(3) калибровочное поле Янга – Миллса. Предлагаемый метод основан на анализе движения цветных заряженных частиц в неабелевом калибровочном поле. Для анализа такого движения используются уравнения Вонга, которые являются обобщением 2 – ого закона Ньютона для частиц, имеющих цветной заряд. Для численного исследования уравнения Вонга записаны в безразмерном виде. Используя анзац для монополя в SU(3) калибровочной теории Янга – Миллса, получены выражения для соответствующих потенциалов и напряженностей полей. Используя уравнения Янга – Миллса, получены асимптотические значения этих полей. С помощью этих выражений численно получены решения уравнений Вонга. Результаты вычислений представлены в виде траекторий движения цветных заряженных частиц.

**Ключевые слова:** уравнения Вонга, уравнения Янга – Миллса, цветные частицы, неабелево калибровочное поле.

Dzhunushaliev V.D.,  
Procenko N.A.

**The motion of colored charged  
particles in the SU (3) non-  
Abelian model of dark matter**

A method of experimental verification of non – Abelian dark matter model where the dark matter is a classic non-Abelian SU (3) gauge field Yang – Mills is proposed. The method is based on the analysis of motion of charged particles in the color non – Abelian gauge field. For the analysis of the motion we use Wong equations that are the generalization of the second Newton law for particles with a color charge. In order to find numerical solution of Wong equations we write them in dimensionless form. Using monopole ansatz of SU(3) Yang – Mills gauge theory we obtain the expressions for gauge potentials and field strengths. Using Yang – Mills equations we obtain asymptotic expressions of these fields. Wong equations are numerically solved with the help of these expressions. The result of calculations is presented as the mechanical trajectories of color charged particles.

**Key words:** Wong equations, Yang – Mills equations, colored particles, non – Abelian gauge field.

Джунушалиев В.Д.,  
Проценко Н.А.

**Қара материяның SU(3)  
неабельдік моделіндегі  
түсті зарядты бөлшектердің  
қозғалысы**

Мақалада қара материя ретінде Янг-Миллстің классикалық неабельдік SU(3) калибрлік өрісі боп табылатын қара материя модельдерінің біреуін эксперименттік тексерісінің әдісі ұсынылады. Ұсынылатын әдіс түсті зарядты бөлшектердің неабельдік калибрлік өрісіндегі қозғалысының талдауында негізделген. Мұндай қозғалысты талдау үшін түсті заряды бар бөлшектері үшін Ньютонның 2-ші заңының жалпылауы болып табылатын Вонг теңдеулері қолданылады. Сандық зерттеу үшін Вонг теңдеулері мөлшерсіз түрде жазылған. Янг – Миллстің SU(3) калибрлік теориясының моноөрісі үшін анзацын пайданана отыра, өрістердің сәйкес потенциалдары мен кернеуліктері үшін өрнектер алынды. Янг – Миллстің теңдеулері пайдалана отыра, бұл өрістердің асимптотикалық мәндері алынған. Осы өрнектер көмегімен Вонг теңдеулерінің шешімдері сандық түрде алынған. Есептеулердің нәтижелері түсті зарядты бөлшектердің қозғалысы траекториялары түрінде көрсетілген.

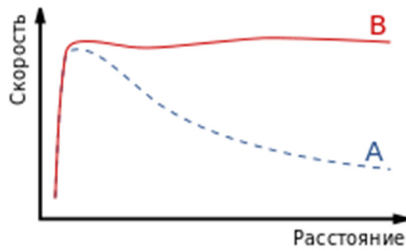
**Түйін сөздер:** Вонг теңдеулері, Янг – Миллс теңдеулері, неабельдік өріс, түсті бөлшек.



## ДВИЖЕНИЕ ЦВЕТНЫХ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В SU(3) НЕАБЕЛЕВОЙ МОДЕЛИ ТЕМНОЙ МАТЕРИИ

### Введение

Тёмная материя – гипотетическая форма материи, которая не испускает электромагнитного излучения и напрямую не взаимодействует с ним. В 1922 году астрономы Джеймс Джинс и Якобус Каптейн исследовали движение звёзд в нашей Галактике и пришли к выводу, что большая часть вещества в галактике невидима; в этих работах, вероятно, впервые появился термин «тёмная материя» [1]. Астроном Фриц Цвикки, в 30-х годах изучая скопления галактик, обнаружил нечто странное [2]. По отдельности галактики не представляли ничего необычного, но исходя из расчетов было видно, что они не могут находиться вместе, а просто должны были разлететься в разные стороны друг от друга. Он заметил, что в скоплениях галактик светящего вещества намного меньше, чем должно быть, чтобы сила тяготения удерживала галактики вместе. Чтобы объяснить это явление он предположил, что существует некое неизвестное вещество, обладающее огромной гравитирующей силой, которое удерживает галактики вместе. Это вещество теперь именуется «темной материей». Это свойство данной формы вещества делает невозможным её прямое наблюдение. Другим наблюдательным данным, иллюстрирующим существование темной материи является измерение скорости вращения периферийных звёзд вокруг центра туманности Андромеды: эти скорости не уменьшались, как предсказывает небесная механика: обратно пропорционально  $\sqrt{R}$  (где  $R$  – расстояние до центра), а оставались почти постоянными, см. Рис 1. Это могло означать, что галактика содержит значительную массу невидимого вещества [3].



**Рисунок 1** – Кривая вращения периферийных звезд в галактике: (A) ожидаемая; (B) реальная

Согласно последним наблюдениям [4], около 69% материи Вселенной состоит из темной энергии, и почти 26% из темной материи. Эти расчеты подтверждаются большим числом независимых наблюдений [5].

Кандидаты на роль темной материи:

1. Барийонная темная материя. Предполагается, что темная материя состоит из барионного вещества, которое слабо взаимодействует с электромагнитным излучением, что делает невозможным его прямое наблюдение.

2. Небарийонная темная материя. Теоретические модели предоставляют большой выбор возможных кандидатов на роль небарионной невидимой материи. Перечислим некоторые из них.

1.1. Нейтрино стандартной модели. После экспериментов по осцилляции ускорительных [6], атмосферных [7] и солнечных [8] нейтрино было полностью доказано что у этих частиц ненулевая масса, следовательно, они должны вносить вклад в скрытую массу. На нынешней момент, нейтрино – единственная частица в кандидаты на ТМ, которую можно зарегистрировать в эксперименте.

1.2. Сверхмассивные нейтрино. Массивные нейтрино уже не являются частицами Стандартной модели. Согласно данным LEP [9], по измерению ширины распада  $Z \rightarrow \nu\bar{\nu}$  – бозона, существует только три типа легких нейтрино ( $\tau$ ,  $\mu$ ,  $e$ ), которые были рассмотрены нами выше и исключается существование тяжелых нейтрино вплоть до 45 ГэВ.

1.3. Стерильное нейтрино. Стерильные нейтрино впервые были упомянуты более 20 лет назад в работе [10]. Модели с данными частицами активно развиваются и классифицируются как расширения Стандартной модели физики элементарных частиц.

1.4. Еще один кандидат на роль скрытой массы – аксионы. Это псевдоскалярная гипотети-

ческая частица, постулированная в 1977 г. в связи с нарушением CP-инвариантности в КХД (квантовая хромодинамика) [11].

1.5. Суперсимметричные частицы. Рассматривая суперсимметричные теории (SUSY), можно предположить, что существует как минимум одна частица, которая подходит на роль темной материи. Существуют теоретические предсказания массы и реликтовой плотности нейтралино. Кроме нейтралино другими возможными кандидатами на роль частиц темной материи являются снейтрино и гравитино. Однако, экспериментальные данные полученные в [12] исключают снейтрино из кандидатов в ТМ.

### Неабелева модель темной материи

В данной работе мы рассматриваем модель темной материи [13] – [15], которая представляет собой классическое неабелево поле. Чтобы экспериментально протестировать эту модель, необходимо рассмотреть движение цветных заряженных частиц в этом поле. В нашей модели роль поля играет классическое неабелево SU(3) калибровочное поле, а в роли частиц выступают цветные заряженные частицы (монополи или уединенные кварки). Цветные заряженные частицы – это неабелево обобщение классического заряда в неабелевых полях. Они характеризуются цветным индексом, который пробегает значение от 1 до 8. Данное SU(3) калибровочное поле является моделью темной материи при описании вращения периферийных звезд в галактике.

Уравнениями, описывающие это калибровочное поле, являются уравнения Янга-Миллса

$$\partial_\nu F^{\mu\nu} = 0 \tag{1}$$

где  $F_{\mu\nu}^a = \partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a + gf^{abc}A_\mu^b A_\nu^c$  – тензор напряженности поля,  $A_\nu^a$  – SU(3) калибровочный потенциал,  $\mu = 0,1,2,3$  – пространственно – временной индекс,  $a=0,1,2,\dots,8$  – цветной индекс,  $g$  – константа связи,  $f^{abc}$  – структурные константы SU(3) калибровочной группы. Уравнения (1) являются нелинейными обобщениями уравнений Максвелла.

Для описания цветных заряженных частиц мы используем систему уравнений Вонга:

$$m \frac{d^2 x^\mu}{ds^2} = -g F_a^{\mu\nu} T^a \frac{dx_\nu}{ds}, \tag{2}$$

$$\frac{dT_a}{ds} = -gf_{abc} \left( A_b^\mu \frac{dx_\mu}{ds} \right) T_c \quad (3)$$

где  $T_a$  – вектор цвета,  $f_{abc}$  – структурные константы  $SU(3)$  калибровочной группы,  $\frac{dx_\mu}{ds} = 4 - x$  скорости частицы. Для простоты мы рассмотрим нерелятивистский случай, когда  $ds \approx cdt$ . К сожалению, невозможно получить аналитическое решение уравнений (2) – (3), поэтому мы будем искать численное решение этих уравнений. Для численных расчетов мы используем систему символьных вычислений Wolfram Mathematica 10.

Для классического  $SU(3)$  калибровочного поля Янга – Миллса калибровочный потенциал  $A_\mu^a$  был выбран анзац в форме [16]:

$$A_0^2 = -2 \frac{z}{gr^2} \chi(r), \quad (4)$$

$$A_0^5 = -2 \frac{y}{gr^2} \chi(r), \quad (5)$$

$$A_0^7 = -2 \frac{x}{gr^2} \chi(r), \quad (6)$$

$$A_i^2 = 2 \frac{\varepsilon_{3ij} x^j}{gr^2} [h(r) + 1], \quad (7)$$

$$A_i^5 = -2 \frac{\varepsilon_{2ij} x^j}{gr^2} [h(r) + 1], \quad (8)$$

$$A_i^7 = 2 \frac{\varepsilon_{1ij} x^j}{gr^2} [h(r) + 1], \quad (9)$$

$$A_i^a = \lambda_{ajk} (\varepsilon_{ilk} x^j + \varepsilon_{ilk} x^k) \frac{x^l}{gr^3} v(r), \quad (10)$$

$$A_1^a = \frac{1}{2} (\lambda_{aij} + \lambda_{aji}) x^i x^j \frac{w(r)}{gr^2} \quad (11)$$

здесь  $A_\mu^{2,5,7} \in SU(2)$  принадлежит подгруппе  $SU(2) \subset SU(3)$ ;  $i, j, k = 1, 2, 3$  являются пространственными индексами. Исходя из этого были рассчитаны напряженности этих полей  $F_a^{\mu\nu}$  и подставлены в уравнения Янга – Миллса (1). Соответствующие уравнения Янга – Миллса (1) с потенциалом (4) – (11) ( $\chi(r) = h(r) = 0$ ) выглядят следующим образом

$$x^2 w'' = 6wv^2, \quad (12)$$

$$x^2 v'' = v^3 - v - vw^2 \quad (13)$$

здесь вводится безразмерный радиус  $x = r/r_0$ ,  $r_0$  произвольная константа. Асимптотическое поведение функций  $v(x)$ ,  $w(x)$  при  $x \gg 1$  [14] следующее:

$$v(x) \approx A \sin(x^\alpha + \phi_0), \quad (14)$$

$$w(x) \approx \pm \left[ \alpha x^\alpha + \frac{\alpha-1}{4} \frac{\cos(2x^\alpha + 2\phi_0)}{x^\alpha} \right], \quad (15)$$

$$3A^2 = \alpha(\alpha - 1) \quad (16)$$

где  $\alpha > 1$ .

Запишем уравнения Вонга в сферической системе координат:

$$m\ddot{r} = -gT^a (F_0^{a1} u^0 + F_1^{a1} u^1 + F_2^{a1} u^2 + F_3^{a1} u^3), \quad (17)$$

$$2mr\dot{\theta} + mr^2\ddot{\theta} =$$

$$= -gT^a (F_0^{a2} u^0 + F_1^{a2} u^1 + F_2^{a2} u^2 + F_3^{a2} u^3), \quad (18)$$

$$\begin{aligned} 2rr\dot{\phi}\sin^2\theta + \theta\dot{\phi}r^2\sin 2\theta + \dot{\phi}r^2\sin^2\theta \\ = -gT^a (F_0^{a3} u^0 + \\ + F_1^{a3} u^1 + F_2^{a3} u^2 + F_3^{a3} u^3). \end{aligned} \quad (19)$$

В правой части уравнений (17) – (19) подставляем асимптотические значения потенциалов (14) (15) и соответствующие значения тензора поля  $F_a^{\mu\nu}$ . В ходе вычислений, для упрощения задачи мы пренебрегли некоторыми слагаемыми, такими как  $\frac{1}{4}x^{-\alpha}$  и т.д.

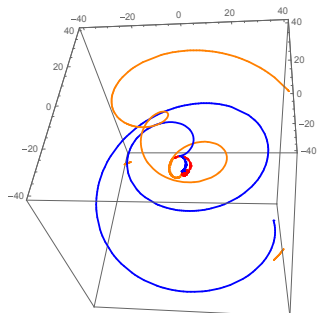
Численные расчеты были проведены для безразмерной системы уравнений Вонга:

$$\frac{d\tilde{x}^i}{d\tilde{t}^2} = -\tilde{F}_{\mu\nu}^a \tilde{T}_a \frac{d\tilde{x}^\nu}{d\tilde{t}}, \quad (20)$$

$$\frac{d\tilde{T}_a}{t_0 d\tilde{t}} = -f_{abc} \left( \tilde{A}_\mu^b * \frac{d\tilde{x}^\mu}{t_0 d\tilde{t}} \right) \tilde{T}_c \quad (21)$$

где  $\tilde{x}^i = \frac{x^i}{R}$  – безразмерная координата частицы,  $\tilde{F}_{\mu\nu}^a = gR^2 \tilde{F}_{\mu\nu}^a$  – безразмерная напряженность поля,  $\tilde{T}_a = \frac{T_a}{R}$  – безразмерный вектор цвета,  $\tilde{A}_\mu^b = gR \tilde{A}_\mu^b$  – безразмерный  $SU(3)$  калибровочный потенциал,  $f^{abc}$  – структурные константы  $SU(3)$  калибровочной группы,  $R$  – некий характерный

размер,  $t_0 = \frac{R}{c}$ ,  $\tilde{t} = \frac{t}{t_0}$ ,  $c$  – скорость света в вакууме.



**Рисунок 2** – Траектории движения цветных заряженных частиц с различными начальными скоростями.

В результате численных вычислений мы получили различные зависимости координат движущихся частиц  $r(t), \theta(t), \varphi(t)$  в поле неабелевого калибровочного потенциала в трехмерном пространстве при различных начальных скоростях, см. Рис 2.

### Заключение

Таким образом, мы видим, что в этой модели темная материя может быть экспериментально обнаружена путем наблюдения за траекториями движения цветных заряженных частиц (моно-полей или уединенных кварков).

### Литература

- 1 Решетников В. Почему небо тёмное. Как устроена Вселенная. – М:Фрязино: Век 2, 2012. – 192 с.
- 2 Zwicky F. Die Rotverschiebung von extragalaktischen Nebeln // *Helvetica Physica Acta*.-1933.-Vol.6. – P.110-127
- 3 Gustavo Y., Stefan G., Hoffman Y. Dark Matter in the Local Universe // *New Astronomy Reviews*.- 2014. – Vol.1.- P.13.
- 4 Planck Collaboration: Ade P. et. al. Planck 2015 results. XIII. Cosmological parameters// *Phys. Rev.* – 2015. – Vol.2. – P.15
- 5 Rafael C. Nunes, Supriya Pan, Emmanuel N. Saridakis. New constraints on interacting dark energy from cosmic chronometers // *Phys. Rev.* – 2016. – Vol. 1. – P.12-17.
- 6 Michael D. G. et al. Observation of muon neutrino disappearance with the minos detectors and the NuMI neutrino beam// *Phys. Rev. Lett.* – 2006. – Vol. 97. – P. 6.
- 7 Adamson P. et. al. First Observations of Separated Atmospheric Muon Neutrino and Muon Anti – Neutrino Events in the MINOS Detector // *Phys. Rev. Lett.* – 2006.- Vol. 79. – P. 17.
- 8 Aharmim B. et al. Electron Energy Spectra, Fluxes, and Day-Night Asymmetries of 8B Solar Neutrinos from the 391-Day Salt Phase SNO Data Set// *Phys. Rev.*-2005.- Vol.1.- P.45.
- 9 Bjorken J. D., Llewellyn Smith C.H. Spontaneously Broken Gauge Theories of Weak Interactions and Heavy Leptons// *Phys. Rev.D* – 1973. – Vol. 7. – P. 887.
- 10 Dodelson S., Widrow L. Sterile Neutrinos as Dark Matter // *Phys. Rev. Lett.* – 1994. –Vol. 72. – P.17.
- 11 Кладдор – Клайнгротхаус Г.В., Цюбер К. *Астрофизика элементарных частиц*.- М.: УФН. – 2000. – 496 с.
- 12 Falk T., Olive K., Srednicki M. Heavy Sneutrinos as Dark Matter // *Phys. Lett. B.* – 1994. –Vol.339. – P. 248-251.
- 13 Dzhunushaliev V. Classical SU(3) Gauge Field as a Dark Matter // *Journal of Modern Physics.* – 2013.- Vol. 4. – P.111-120.
- 14 Dzhunushaliev V. Colored dark matter // *Science Echoes*.- 2008. – Vol.4. No.1. – P.47-69.
- 15 Dzhunushaliev V. Classical color fields as a dark matter candidate // *Central Eur. J. Phys.*.-2007. – Vol. 5. – P. 342.
- 16 Dzhunushaliev V. D., Singleton D. *Confining Solutions of SU(3) Yang-Mills Theory* // Nova Science Publishers, Hauppauge. -1999. – P.336 – 346.

### References

- 1 V. Reshetnikov, *Pochemu nebo tomnoye. Kak ustroyena Vselennaya.* – M:Fryazino: Vek 2, 2012, 192 s. (in russ).
- 2 F. Zwicky, *Helvetica Physica Acta*, 6, 110-127, (1933).
- 3 Y. Gustavo, G. Stefan, Y. Hoffman, *New Astronomy Reviews*, 1, 13, (2014).
- 4 Planck Collaboration: Ade P. et. al., *Phys. Rev.*, 2, 15, (2015).
- 5 Rafael C. Nunes, Supriya Pan, Emmanuel N. Saridakis, *Phys. Rev.* 1, 12-17, (2016).
- 6 Michael D. G. et al., *Phys. Rev. Lett.*, 97, 6, (2006).
- 7 P. Adamson et. al., *Phys. Rev. Lett.*, 79, 17, (2006).
- 8 B. Aharmim et al., *Phys. Rev.*, 1, 45, (2005).
- 9 J.D. Bjorken, Llewellyn Smith C.H., *Phys. Rev. D*, 7, 887, (1973).
- 10 S. Dodelson, L. Widrow, *Phys. Rev. Lett.*, 72, 17, (1994).
- 11 Klapdor – Klayngrotkhaus G.V., Tsyuber K. *Astrofizika elementarnykh chastits*.- M.: UFN, 2000. – 496 s. (in russ).
- 12 T. Falk, K. Olive, M. Srednicki, *Phys. Lett. B*, 339, 248-251, (1994).
- 13 V. Dzhunushaliev, *Journal of Modern Physics*, 4, 111-120, (2003).
- 14 V. Dzhunushaliev, *Science Echoes*, 4(1), 47-69, (2008).
- 15 V. Dzhunushaliev, *Central Eur. J. Phys.*, 5, 342, (2007).
- 16 V.D. Dzhunushaliev, D. Singleton, Nova Science Publishers, Hauppauge, 336-346, (2009).



Уразалина А.А.,  
Джунушалиев В.Д.,  
Синглетон Д.

## Фантомные решения со скалярными полями в ОТО с различными потенциалами

В данной работе исследованы фантомные доменные, горловинные, сферически симметричные и цилиндрически симметричные решения в общей теории относительности, создаваемые двумя фантомными скалярными полями с потенциальными слагаемыми 4-го, 6-го, 8-го порядков. Рассмотрены регулярные решения, имеющие конечную плотность энергии, существующие только при некоторых определенных значениях параметров  $m_1, m_2$ . Фантомные решения соответствующих полевых уравнений получены в численном виде как решение нелинейной задачи на собственные значения, где собственными значениями являются параметры  $m_1, m_2$ , а собственными функциями скалярные поля. Получены решения, зависящие от значений одного из скалярных полей в центрах доменной стенки, горловины, бозонной звезды и струны для разных потенциалов. Представлена зависимость параметров  $m_1, m_2$  от начальных значений  $\chi_0$  для разных потенциалов. Показано, что для фантомной космической струны с параметрами  $\chi_0 = 0.7$  при  $\phi_0 = 1, \lambda_1 = 0.15, \lambda_2 = 1.1$  и с потенциальным слагаемым 4-го порядка решение не существует. Для доменной стенки в случае обычного ( $\epsilon = +1$ ) скалярного поля с потенциальным слагаемым 8-го порядка с параметрами  $\chi_0 = 0.7$  при  $\phi_0 = 1, \lambda_1 = 0.15, \lambda_2 = 1.1$  решения также не существуют. Это позволяет сделать вывод, что существование протяженных решений существенно зависит от вида потенциального слагаемого скалярных полей. Для каждой пары собственных значений  $m_1, m_2$  рассчитана плотность энергии доменной стенки, горловины, бозонной звезды и космических струн  $T_0^0$  и по полученным данным построена зависимость этой плотности от соответствующей координаты.

**Ключевые слова:** доменная стенка, горловинные решения, сферически симметричные решения, цилиндрически симметричные решения, фантомные скалярные поля

Urazalina A.,  
Dzhunushaliev V.,  
Singleton D.

## Phantom solutions with scalar fields in GR with different potentials

Domain, wormhole, spherically symmetric and cylindrically symmetric solutions in general relativity created with two phantom scalar fields with potentials of the 4th, 6th and 8th orders are investigated. It has been shown that the solutions with finite energy exist for some specific values of the parameters  $m_1, m_2$  only. Corresponding field equations are solved numerically as nonlinear eigenvalue problem where the parameters  $m_1, m_2$  are eigenvalues and scalar fields are eigenfunctions. The phantom solutions depending on values of scalar fields at the center of phantom domain, wormhole, spherically symmetrical and cylindrically symmetric solutions are obtained. The dependence of parameters  $m_1, m_2$  on initial values  $\chi_0$  is investigated. The solutions depending on the value of scalar field at the centers of the domain wall, throat, boson star, and string for different potentials are obtained. The dependence of  $m_1, m_2$  parameters on the initial values  $\chi_0$  for different potentials is presented. It is shown that for a phantom cosmic string with parameters  $\chi_0 = 0.7, \phi_0 = 1, \lambda_1 = 0.15, \lambda_2 = 1.1$  there is no solution with a fourth order potential term. For a domain wall created by usual scalar field ( $\epsilon = +1$ ) and having potential term of the 8th order with the parameters  $\chi_0 = 0.7$  for  $\phi_0 = 1, \lambda_1 = 0.15, \lambda_2 = 1.1$  solutions do not exist also. This allows us to conclude that the existence of extended solutions essentially depends on the form of the potential term of scalar fields. For each pair of eigenvalues  $m_1, m_2$ , the  $T_0^0$  energy density of the domain wall, wormhole, boson star and cosmic strings is calculated and the dependence of this density on the corresponding coordinate is constructed from the obtained data.

**Key words:** domain solutions, wormhole solutions, spherically symmetric solutions, cylindrically symmetric solutions, phantom scalar fields

Оразалина А.А.,  
Джунушалиев В.Д.,  
Синглетон Д.

## ЖСТ – дағы потенциалдары әртүрлі скалярлық өрістері бар фантомдық шешімдер

Бұл жұмыста жалпы салыстырмалылық теориядағы 4-ші, 6-шы, 8-ші ретті потенциалдық қосылғыштары бар екі фантомдық скалярлық өрістер тудыратын, фантомдық домендік, өңештік, сфералық симметриялық, цилиндрилік симметриялық шешімдер зерттелген. Ақырғы энергия тығыздығы бар регулярлық шешімдердің тек  $m_1, m_2$  параметрлерінің кейбір белгілі мәндері кезінде ғана болатындығы қарастырылған. Сәйкес өрістік теңдеулердің шешімдері меншікті мәндерге түзілген сызықсыз теңдеудің шешімі ретінде сандық түрде алынған, мұндағы  $m_1, m_2$  параметрлер меншікті мәндер болып табылады, ал меншікті функциялар – скалярлық өрістер. Домендік қабырға, өңеш, бозондық жұлдыздар және ішектер центрлерінде скалярлық өрістердің бірінің мәндеріне тәуелді болатын шешімдері алынған. Жүйенің  $m_1, m_2$  параметрлерінің  $\chi_0$  бастапқы мәндерге тәуелділігі көрсетілген. Әртүрлі потенциалдар үшін домендік қабырғалар, өңеш, бозондық жұлдыз және ішектер центрлерінде скалярлық өрістердің бірінің мәніне тәуелді шешімдер алынған. Әртүрлі потенциалдар үшін  $m_1, m_2$  параметрлерінің  $\chi_0$  бастапқы мәндеріне тәуелділігі көрсетілген. Фантомдық космостық ішектің  $\phi_0 = 1, \lambda_1 = 0.15, \lambda_2 = 1.1$  болғанда  $\chi_0 = 0.7$  параметрлерінде және потенциалдық қосылғышы 4-ші ретті болғанда шешім болмайтындығы көрсетілген. Домендік қабырғаның да  $\phi_0 = 1, \lambda_1 = 0.15, \lambda_2 = 1.1$  болғанда  $\chi_0 = 0.7$  параметрлерінде және потенциалдық қосылғышы 8-ші ретті болғанда шешім болмайтындығы көрсетілген. Бұл скалярлық өрістердің потенциалдық қосылғышының түріне регулярлық шешімнің бар болуына айтарлықтай тәуелді, деген шешім шығаруға мүмкіндік береді.  $m_1, m_2$  меншікті мәндердің әрбір жұбына домендік қабырға, өңеш, бозондық жұлдыздар және ішектердің  $T_0^0$  энергия тығыздығы есептелінген және алынған мәндерден бұл тығыздықтың сәйкес координаталарға тәуелділігі тұрғызылған.

**Түйін сөздер:** домендік қабырға, өңештік шешімдер, сфералық симметриялық шешімдер, цилиндрилік симметриялық шешімдер, фантомдық скалярлық өрістер

## ФАНТОМНЫЕ РЕШЕНИЯ СО СКАЛЯРНЫМИ ПОЛЯМИ В ОТО С РАЗЛИЧНЫМИ ПОТЕНЦИАЛАМИ

### Введение

В последние годы интерес к получению регулярных решений существенно возрос, в первую очередь из-за открытия ускоренного расширения современной Вселенной. В настоящее время широко распространено мнение, что такое ускорение связано с присутствием во Вселенной какой-то особой формы материи – темной энергии. Одной из ключевых особенностей последней является ее способность нарушать различные энергетические условия доминантности. Одной из моделей темной энергии являются фантомные поля.

Темная энергия моделируется с помощью нарушения нулевого энергетического условия, когда эффективное давление  $p$  материи, заполняющей Вселенную отрицательно по модулю и больше, чем его плотность энергии  $\varepsilon$ , т.е.  $p < -\varepsilon$ . Такое вещество называют экзотической материей.

В работе исследуются регулярные решения в общей теории относительности, где гравитирующей материей являются два фантомных скалярных поля. В [1] были получены доменные стенки (плоские), сферически симметричные, горловинные и цилиндрически симметричные решения с потенциальным слагаемым 4-го порядка для такого рода фантомных скалярных полей. Здесь мы исследуем возможность существования такого рода решений с потенциальными слагаемыми 6-го и 8-го порядка, а также сравниваем полученные результаты с результатами, полученными ранее для фантомного скалярного поля с потенциалом 4-ого порядка.

В данной работе мы рассматриваем: (а) звездообразные, горловинные решения как сферически симметричные конфигурации, поддерживаемые скалярными полями; (б) цилиндрически симметричные решения (космические струны); (в) плоско симметричные доменные стенки.

Космические струны являются протяженными конфигурациями, которые могли образоваться в ранней Вселенной при фазовых переходах, связанных со спонтанным нарушением симметрии [2]-[5]. Здесь мы исследуем фантомные космические струны, построенные с помощью двух взаимодействующих скалярных полей [6].

Другой категорией протяженных объектов являются плоские симметричные доменные стенки, которые являются топологическими дефектами, возникающими как в физике элементарных частиц так и в космологии [3, 7]. В частности, решения типа доменных стенок существуют в теориях, где потенциал скалярного поля имеет изолированные минимумы. Тогда доменной стенкой является поверхность, разделяющая различные минимумы скалярного потенциала [8]. В этом случае скалярное поле меняется в пространстве и стремится к одному минимуму в одном направлении и к другому минимуму в противоположенном направлении. Область быстрого изменения скалярного поля соответствует доменной стенке. В приближении тонкой стенки изменение скалярной плотности энергии поля локализуется на поверхности доменной стенки и заменяется дельта-функцией [9]. В случае, когда все поля постоянны с каждой стороны стенки, то есть они находятся в минимумах потенциала, доменные стенки называются вакуумными доменными стенками.

В данной статье мы рассмотрим все четыре типа конфигураций (доменные стенки, бозонные звезды, горловины, космические струны), построенные из двух взаимодействующих фантомных скалярных полей с различными потенциалами. Системы с двумя обычными скалярными полями хорошо известны из квантовой теории поля, где они используются для получения одиночных волновых решений [10]. При наличии гравитационного поля, такие системы также неоднократно рассматривались в космологическом и астрофизическом контекстах [11]. В наших предыдущих работах мы получили ряд решений с двумя скалярными полями (как для нормальных скалярных полей, так и для фантомных), которые могут быть использованы для описания астрофизических объектов, а также при рассмотрении космологических решений. Мы рассмотрели регулярные сферически и цилиндрически симметричные решения [12-14]; космологические решения [15, 16]; толстые бранные решения, поддерживаемые нормальными и фантомными скалярными полями [17]. В данной работе мы продолжаем исследования в этом направлении, рассматривая скалярные поля с различными потенциалами.

### Общие уравнения

Уравнения Эйнштейна можно записать в виде

$$R_i^k - \frac{1}{2} \delta_i^k R = 8\pi G T_i^k, \quad (1)$$

где  $R_i^k$  – тензор Риччи;  $R$  – скалярная кривизна;  $i, k = 0, 1, 2, 3$ .

Уравнения для фантомных скалярных полей представлены в виде

$$\frac{1}{\sqrt{-g}} \frac{\partial}{\partial x^i} \left[ \sqrt{-g} g^{ik} \frac{\partial(\phi, \chi)}{\partial x^k} \right] = - \frac{\partial V}{\partial(\phi, \chi)}. \quad (2)$$

Мы рассмотрим два взаимодействующих фантомных скалярных поля, имеющих специальный вид потенциальной энергии:

$$V(\phi, \chi) = \frac{\lambda_1}{4} (\phi^2 - m_1^2)^2 + \frac{\lambda_2}{4} (\chi^2 - m_2^2)^2 + \phi^2 \chi^2 - V_0, \quad (3)$$

$$V(\phi, \chi) = \frac{\lambda_1}{2} \phi^2 (\phi^2 - m_1^2)^2 + \frac{\lambda_2}{2} \chi^4 (\chi^2 - m_2^2) + \frac{1}{2} \phi^2 \chi^2 - V_0, \quad (4)$$

$$V(\phi, \chi) = \frac{\lambda_1}{4} \phi^4 (\phi^2 - m_1^2)^2 + \frac{\lambda_2}{2} \chi^4 (\chi^2 - m_2^2) + \frac{1}{2} \phi^2 \chi^2 - V_0 \quad (5)$$

здесь  $\phi$  и  $\chi$  два скалярных поля с некоторыми параметрами  $m_1$  и  $m_2$ ,  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$  являются константами самодействия и  $V_0$  некоторая константа, которая должна быть выбрана при постановке задачи.

Соответствующий тензор энергии-импульса будет выглядеть следующим образом:

$$T_i^k = \varepsilon \left\{ \partial_i \phi \partial^k \phi + \partial_i \chi \partial^k \chi - \delta_i^k \left[ \frac{1}{2} \partial_j \phi \partial^j \phi + \frac{1}{2} \partial_j \chi \partial^j \chi - V(\phi, \chi) \right] \right\} \quad (6)$$

### Плоские решения

Используя (2) – (6) (при  $\varepsilon = -1$ ), мы можем получить уравнения Эйнштейна (1) и полевые уравнения для скалярных полей:



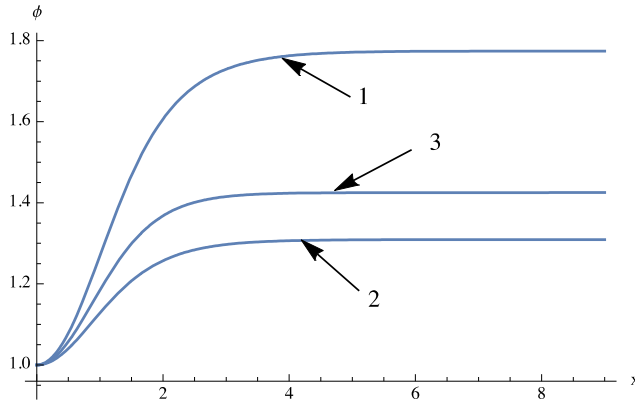
$$3\left(\frac{a'}{a}\right)^2 = -\frac{1}{2}(\phi'^2 + \chi'^2) + V, \quad (7)$$

$$\chi'' + 3\frac{a'}{a}\chi' = \chi[2\phi^2 + \lambda_2(\chi^2 - m_2^2)]. \quad (10)$$

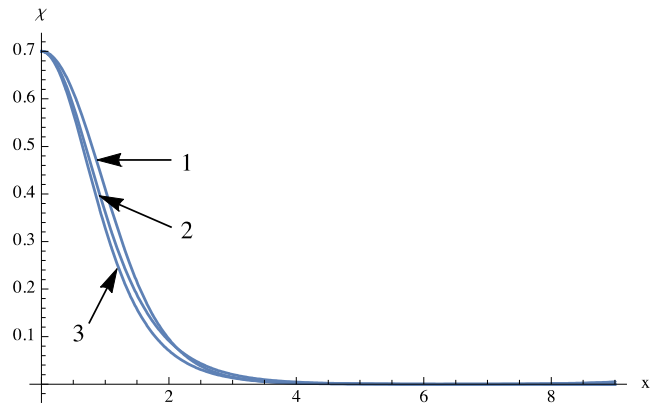
$$\frac{a''}{a} - \left(\frac{a'}{a}\right)^2 = \frac{1}{2}(\phi'^2 + \chi'^2), \quad (8)$$

$$\phi'' + 3\frac{a'}{a}\phi' = \phi[2\chi^2 + \lambda_1(\phi^2 - m_1^2)], \quad (9)$$

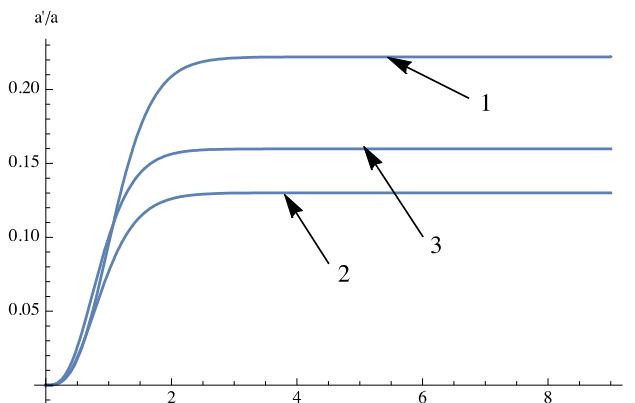
Результаты численных расчетов для фантомных ( $\varepsilon = -1$ ) скалярных полей приведены на рис. 1, 2; для метрических функций  $a(x)$  – на рис. 3 и для плотности энергии  $T_0^0$  – на рис. 4.



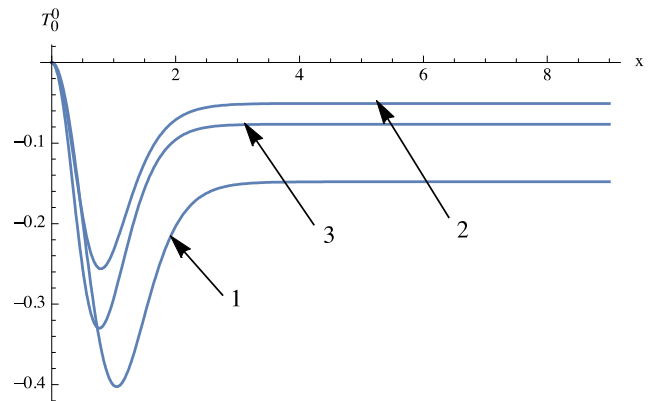
**Рисунок 1** – Профили фантомного скалярного поля  $\phi$  для доменной стенки. Кривая 1 соответствует потенциалу 4-го порядка, кривая 2 – потенциалу 6-го порядка, кривая 3 – потенциалу 8-го порядка



**Рисунок 2** – Профили фантомного скалярного поля  $\chi$  для доменной стенки. Кривая 1 соответствует потенциалу 4-го порядка, кривая 2 – потенциалу 6-го порядка, кривая 3 – потенциалу 8-го порядка



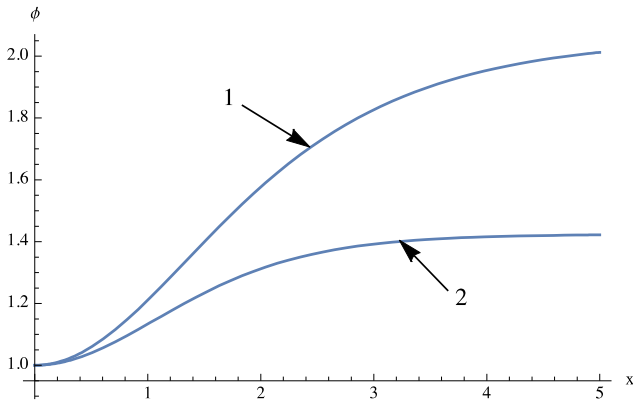
**Рисунок 3** – Метрическая функция  $a(x)$  для доменной стенки в случае фантомного скалярного поля. Кривая 1 соответствует потенциалу 4-го порядка, кривая 2 – потенциалу 6-го порядка, кривая 3 – потенциалу 8-го порядка



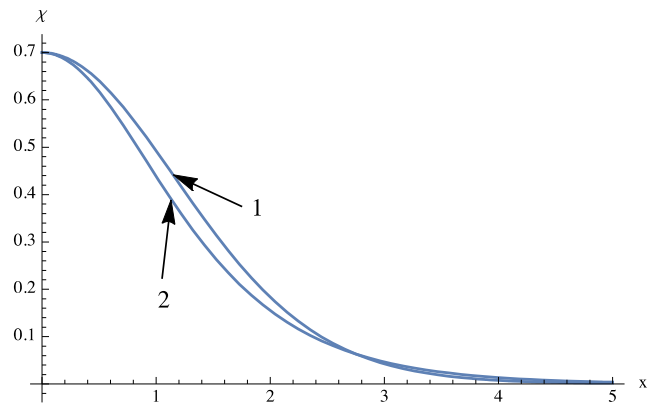
**Рисунок 4** – Профили плотности энергии  $T_0^0(x)$  для доменной стенки в случае фантомного скалярного поля. Кривая 1 соответствует потенциалу 4-го порядка, кривая 2 – потенциалу 6-го порядка, кривая 3 – потенциалу 8-го порядка

Результаты численных расчетов для обычных ( $\varepsilon = +1$ ) скалярных полей приведены на

рис. 5, 6; для метрических функций  $a(x)$  – на рис. 7 и для плотности энергии  $T_0^0$  – на рис. 8.



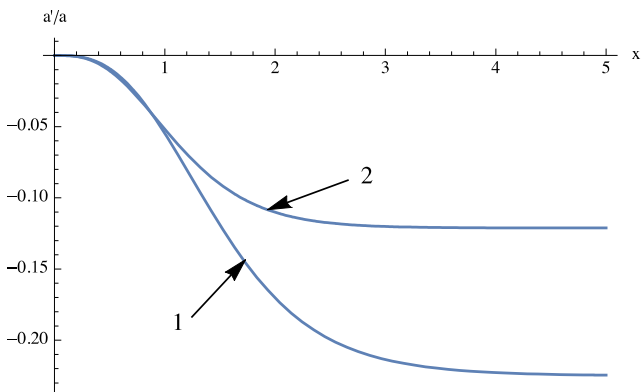
**Рисунок 5** – Профили обычного ( $\varepsilon = +1$ ) скалярного поля  $\phi$  для доменной стенки. Кривая 1 соответствует потенциалу 4-го порядка, кривая 2 – потенциалу 6-го порядка.



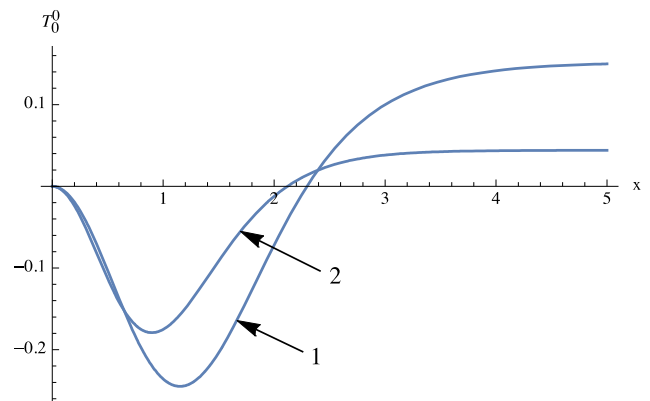
**Рисунок 6** – Профили обычного ( $\varepsilon = +1$ ) скалярного поля  $\chi$  для доменной стенки. Кривая 1 соответствует потенциалу 4-го порядка, кривая 2 – потенциалу 6-го порядка.

**Таблица 1** – Начальные значения  $\chi_0 = 0.7$  и соответствующие значения параметров  $m_1, m_2$  с потенциалами 4-го, 6-го и 8-го порядков при  $\varepsilon = \pm 1, \phi_0 = 1, \lambda_1 = 0,15, \lambda_2 = 1.1$  для доменной стенки

№	Потенциалы	$\varepsilon$	$m_1$	$m_2$
1	4-го порядка	-1	1.77426601	1.80400455
2	6-го порядка	-1	1.30901092	1.73766048
3	8-го порядка	-1	1.4251234264	1.7965336329
4	4-го порядка	+1	2.05880064139	1.720175382122
5	6-го порядка	+1	1.42405708294	1.61615084819
6	8-го порядка	+1	Решения нет	Решения нет



**Рисунок 7** – Метрическая функция  $a(x)$  для доменной стенки в случае обычного ( $\varepsilon = +1$ ) скалярного поля. Кривая 1 соответствует потенциалу 4-го порядка, кривая 2 – потенциалу 6-го порядка.



**Рисунок 8** – Профили плотности энергии  $T_0^0(x)$  для доменной стенки в случае обычного ( $\varepsilon = +1$ ) скалярного поля. Кривая 1 соответствует потенциалу 4-го порядка, кривая 2 – потенциалу 6-го порядка.

### Сферически симметричные решения

Уравнение Эйнштейна и скалярные уравнения поля для фантомного шара:

$$\frac{1}{r} \frac{A'}{A^2} + \frac{1}{r^2} \left(1 - \frac{1}{A}\right) = -\frac{1}{2A} (\phi'^2 + \chi'^2) - V(\phi, \chi), \quad (11)$$

$$\frac{1}{r} \frac{B'}{AB} - \frac{1}{r^2} \left(1 - \frac{1}{A}\right) = -\frac{1}{2A} (\phi'^2 + \chi'^2) + V(\phi, \chi), \quad (12)$$

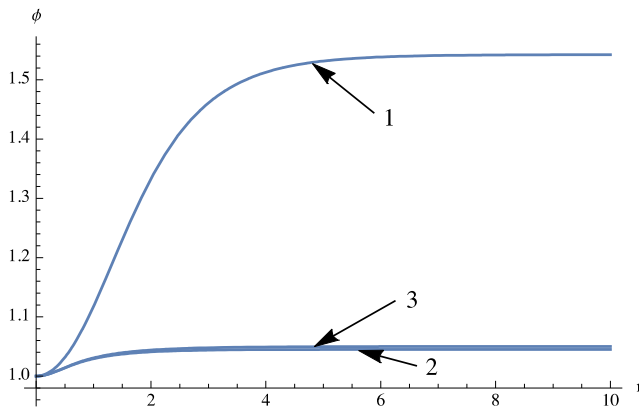
$$\frac{B''}{B} - \frac{1}{2} \left(\frac{B'}{B}\right)^2 - \frac{1}{2} \frac{A' B'}{A B} - \frac{1}{r} \left(\frac{A'}{A} - \frac{B'}{B}\right) = 2A \left[\frac{1}{2A} (\phi'^2 + \chi'^2) + V(\phi, \chi)\right], \quad (13)$$

$$\phi'' + \left(\frac{2}{r} + \frac{B'}{2B} - \frac{A'}{2A}\right) \phi' = A\phi [2\chi^2 + \lambda_1(\phi^2 - m_1^2)], \quad (14)$$

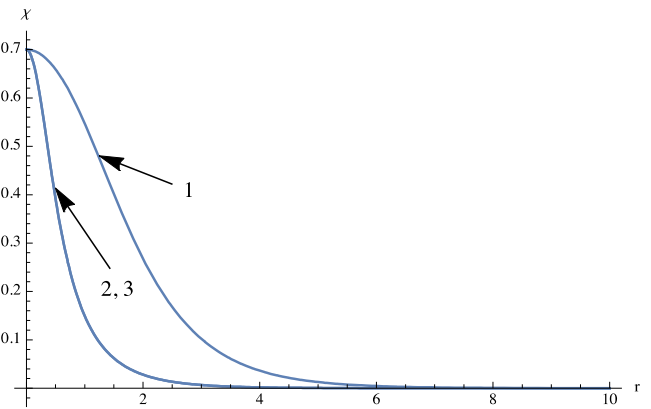
$$\chi'' + \left(\frac{2}{r} + \frac{B'}{2B} - \frac{A'}{2A}\right) \chi' = A\chi [2\phi^2 + \lambda_2(\chi^2 - m_2^2)]. \quad (15)$$

Результаты численных расчетов для фантомных ( $\varepsilon = -1$ ) скалярных полей приведены на рис. 9, 10; для метрических функций  $A(r), B(r)$  – на рис.

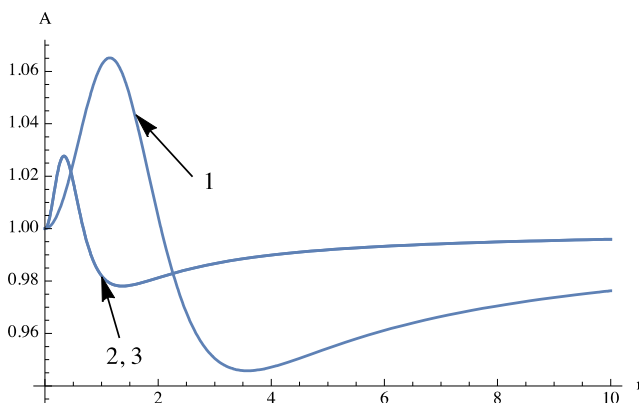
11, 12 и для плотности энергии  $T_0^0$  – на рис. 13. В рисунках 10-13 решения для потенциалов 6-го и 8-го порядков практически совпадают.



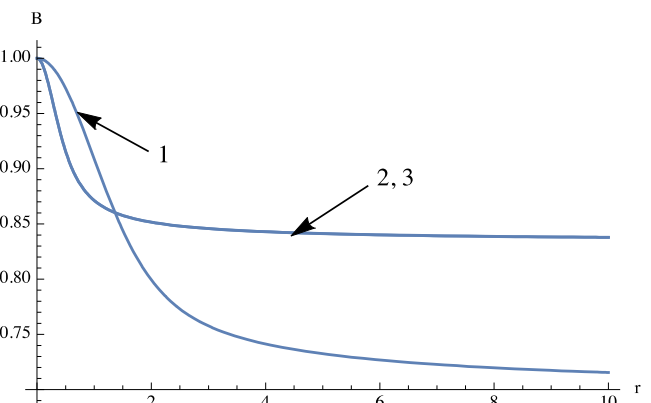
**Рисунок 9** – Профили фантомного скалярного поля  $\phi$  для бозонной звезды. Кривая 1 соответствует потенциалу 4-го порядка, кривая 2 – потенциалу 6-го порядка, кривая 3 – потенциалу 8-го порядка.



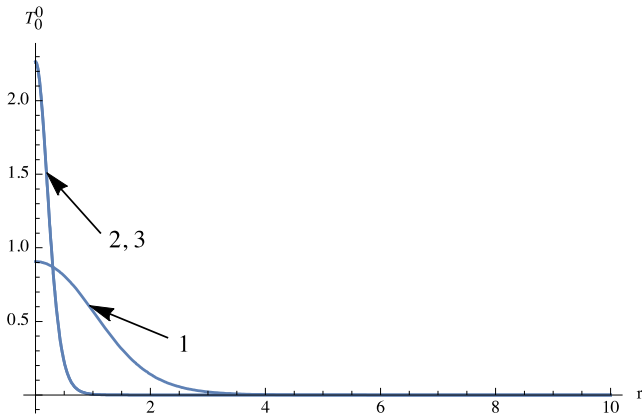
**Рисунок 10** – Профили фантомного скалярного поля  $\chi$  для бозонной звезды. Кривая 1 соответствует потенциалу 4-го порядка, кривая 2 – потенциалу 6-го порядка, кривая 3 – потенциалу 8-го порядка.



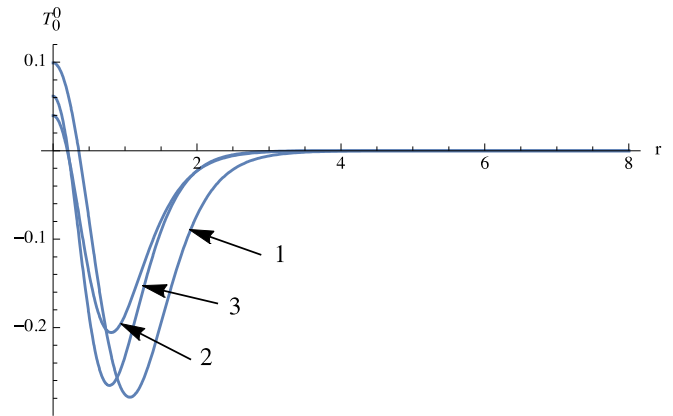
**Рисунок 11** – Метрические функции  $A(r)$  для бозонной звезды в случае фантомного скалярного поля. Кривая 1 соответствует потенциалу 4-го порядка, кривая 2 – потенциалу 6-го порядка, кривая 3 – потенциалу 8-го порядка.



**Рисунок 12** – Метрические функции  $B(r)$  для бозонной звезды в случае фантомного скалярного поля. Кривая 1 соответствует потенциалу 4-го порядка, кривая 2 – потенциалу 6-го порядка, кривая 3 – потенциалу 8-го порядка.



**Рисунок 13** – Профили плотности энергии  $T_0^0(r)$  для бозонной звезды в случае фантомного скалярного поля. Кривая 1 соответствует потенциалу 4-го порядка, кривая 2 – потенциалу 6-го порядка, кривая 3 – потенциалу 8-го порядка.



**Рисунок 14** – Профили плотности энергии  $T_0^0(r)$  для проходимой червоточины в случае фантомного скалярного поля. Кривая 1 соответствует потенциалу 4-го порядка, кривая 2 – потенциалу 6-го порядка, кривая 3 – потенциалу 8-го порядка.

**Таблица 2** – Начальные значения  $\chi_0 = 0.7$  и соответствующие значения параметров  $m_1, m_2$  с потенциалами 4-го, 6-го и 8-го порядков при  $\phi_0 = 1, \lambda_1 = 0,15, \lambda_2 = 1.1$  для фантомного шара.

№	Потенциалы	$m_1$	$m_2$
1	4-го порядка	1.54248223	1.89958804
2	6-го порядка	1.04506272	4.1962616
3	8-го порядка	1.050035	4.2023521

### Горловинные решения

Можно получить следующую полную систему уравнений Эйнштейна и скалярных урав-

нений поля для фантомной проходимой горловины:

$$\frac{A''}{A} - \frac{1}{2} \left( \frac{A'}{A} \right)^2 - \frac{1}{2} \frac{A' B'}{A B} = \phi'^2 + \chi'^2, \quad (16)$$

$$\frac{A''}{A} + \frac{1}{2} \frac{A' B'}{A B} - \frac{1}{2} \left( \frac{A'}{A} \right)^2 - \frac{1}{2} \left( \frac{B'}{B} \right)^2 + \frac{B''}{B} = 2 \left[ \frac{1}{2} (\phi'^2 + \chi'^2) + V \right], \quad (17)$$

$$\frac{1}{4} \left( \frac{A'}{A} \right)^2 - \frac{1}{A} + \frac{1}{2} \frac{A' B'}{A B} = -\frac{1}{2} (\phi'^2 + \chi'^2) + V, \quad (18)$$

$$\phi'' + \left( \frac{A'}{A} + \frac{1}{2} \frac{B'}{B} \right) \phi' = \phi [2\chi^2 + \lambda_1 (\phi^2 - m_1^2)], \quad (19)$$

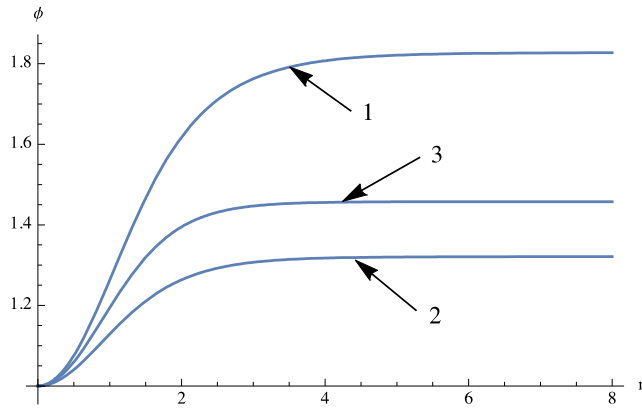
$$\chi'' + \left( \frac{A'}{A} + \frac{1}{2} \frac{B'}{B} \right) \chi' = \chi [2\phi^2 + \lambda_2 (\chi^2 - m_2^2)]. \quad (20)$$

Результаты численных расчетов для фантомных ( $\varepsilon = -1$ ) скалярных полей приведены на рис. 15,

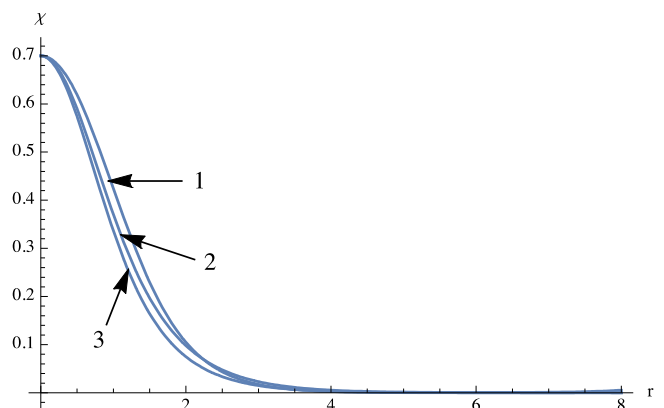
16; для метрических функций  $A(r), B(r)$  – на рис. 17, 18 и для плотности энергии  $T_0^0$  – на рис. 14.

**Таблица 3** – Начальные значения  $\chi_0 = 0.7$  и соответствующие значения параметров  $m_1, m_2$  с потенциалами 4-го, 6-го и 8-го порядков при  $\phi_0 = 1, \lambda_1 = 0,15, \lambda_2 = 1.1$  для фантомной проходимой червотчины

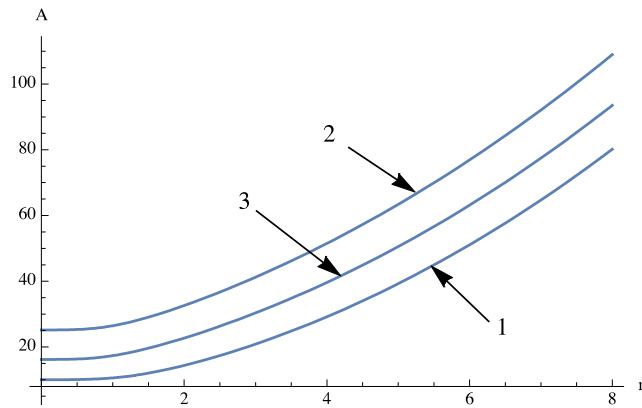
№	Потенциалы	$m_1$	$m_2$
1	4-го порядка	1.82729811	1.7869422825
2	6-го порядка	1.32067169	1.7205753
3	8-го порядка	1.45731329	1.7806672



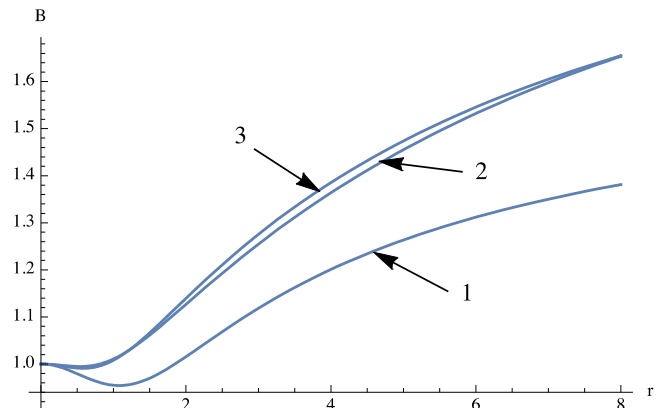
**Рисунок 15** – Профили фантомного скалярного поля  $\phi$  для проходимой червотчины. Кривая 1 соответствует потенциалу 4-го порядка, кривая 2 – потенциалу 6-го порядка, кривая 3 – потенциалу 8-го порядка.



**Рисунок 16** – Профили фантомного скалярного поля  $\chi$  для проходимой червотчины. Кривая 1 соответствует потенциалу 4-го порядка, кривая 2 – потенциалу 6-го порядка, кривая 3 – потенциалу 8-го порядка.



**Рисунок 17** – Метрические функции  $A(r)$  для проходимой червотчины в случае фантомного скалярного поля. Кривая 1 соответствует потенциалу 4-го порядка, кривая 2 – потенциалу 6-го порядка, кривая 3 – потенциалу 8-го порядка.



**Рисунок 18** – Метрические функции  $B(r)$  для проходимой червотчины в случае фантомного скалярного поля. Кривая 1 соответствует потенциалу 4-го порядка, кривая 2 – потенциалу 6-го порядка, кривая 3 – потенциалу 8-го порядка.

### Цилиндрически симметричные решения

Можно получить уравнения Эйнштейна и скалярного поля для космической струны:

$$\frac{\gamma'}{\rho} - \psi'^2 = -k \left( \frac{1}{2} \phi'^2 + \frac{1}{2} \chi'^2 + e^{2(\gamma-\psi)} V(\phi, \chi) \right), \quad (21)$$

$$\frac{\nu' + \psi'}{\rho} - \psi'^2 = -k \left( \frac{1}{2} \phi'^2 + \frac{1}{2} \chi'^2 - e^{2(\gamma-\psi)} V(\phi, \chi) \right), \quad (22)$$

$$\psi'' - \nu'' - \psi'\gamma' + \nu'\gamma' - \nu'^2 + \frac{\psi'+\gamma'-\nu'}{\rho} = k \left( -\frac{1}{2}\phi'^2 - \frac{1}{2}\chi'^2 - e^{2(\gamma-\psi)}V(\phi, \chi) \right), \quad (23)$$

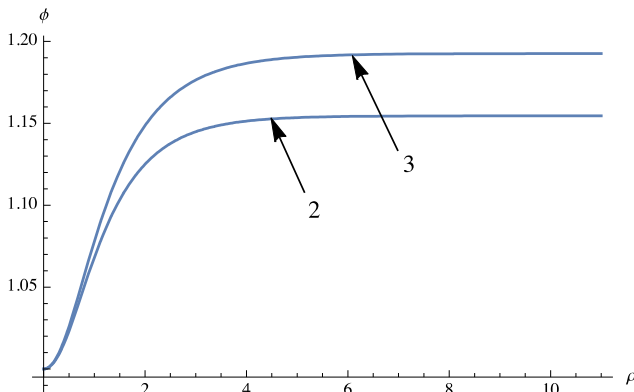
$$-\psi'' - \nu'' + \psi'\gamma' + \nu'\gamma' - 2\psi'^2 - 2\psi'\nu' - \nu'^2 = k \left( -\frac{1}{2}\phi'^2 - \frac{1}{2}\chi'^2 - e^{2(\gamma-\psi)}V(\phi, \chi) \right), \quad (24)$$

$$\phi'' + \phi' \left( \frac{1}{\rho} - \gamma' + \psi' + \nu' \right) = e^{2(\gamma-\psi)}\phi [2\chi^2 + \lambda_1(\phi^2 - m_1^2)], \quad (25)$$

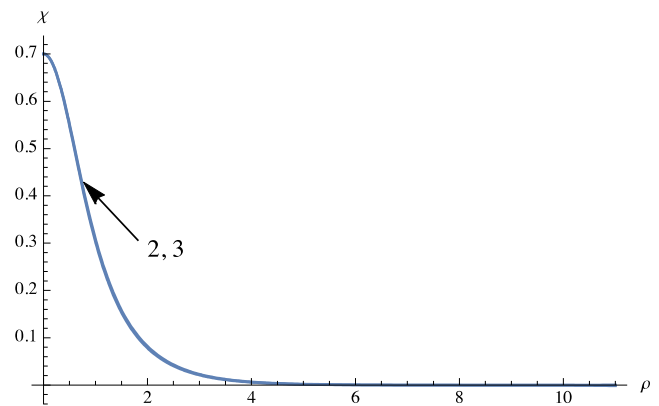
$$\chi'' + \chi' \left( \frac{1}{\rho} - \gamma' + \psi' + \nu' \right) = e^{2(\gamma-\psi)}\chi [2\phi^2 + \lambda_2(\chi^2 - m_2^2)]. \quad (26)$$

Результаты численных расчетов для фантомных ( $\varepsilon = -1$ ) скалярных полей  $\phi, \chi$ , приведены на рис. 19, 20; для метрических функций  $\gamma(\rho), \psi(\rho)$  – на рис. 21, 22 и для

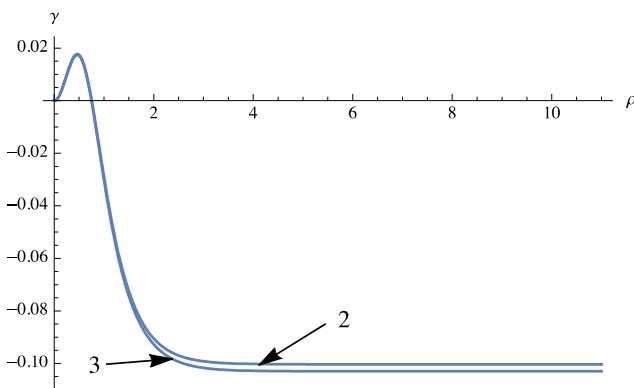
плотности энергии  $T_0^0$  – на рис. 23. В рисунках 20, 23 соответствующие профили для потенциалов 6-го и 8-го порядков практически совпадают.



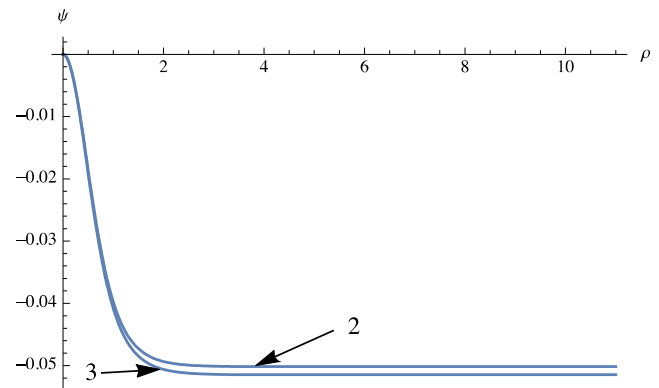
**Рисунок 19** – Профили фантомного скалярного поля  $\phi$  для космических струн. Кривая 2 соответствует потенциалу 6-го порядка, кривая 3 – потенциалу 8-го порядка.



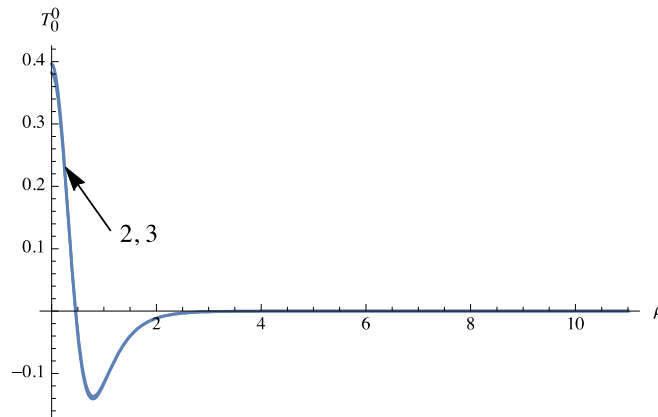
**Рисунок 20** – Профили фантомного скалярного поля  $\chi$  для космических струн. Кривая 2 соответствует потенциалу 6-го порядка, кривая 3 – потенциалу 8-го порядка.



**Рисунок 21** – Метрические функции  $\gamma(\rho)$  для фантомных космических струн. Кривая 2 соответствует потенциалу 6-го порядка, кривая 3 – потенциалу 8-го порядка.



**Рисунок 22** – Метрические функции  $\psi(\rho)$  для фантомных космических струн. Кривая 2 соответствует потенциалу 6-го порядка, кривая 3 – потенциалу 8-го порядка.



**Рисунок 23** – Профили плотности энергии  $T_0^0(\rho)$  для фантомных космических струн. Кривая 2 соответствует потенциалу 6-го порядка, кривая 3 – потенциалу 8-го порядка.

**Таблица 4** – Начальные значения  $\chi_0 = 0.7$  и соответствующие значения параметров  $m_1, m_2$  с потенциалами 4-го, 6-го и 8-го порядков при  $\phi_0 = 1, \lambda_1 = 0,15, \lambda_2 = 1.1$  для фантомных космических струн

№	Потенциалы	$m_1$	$m_2$
1	4-го порядка	Решения нет	Решения нет
2	6-го порядка	1.154579476	2.30250731
3	8-го порядка	1.1926167892	2.32316842475

### Заключение

Таким образом, в статье получены плоские, сферически симметричные, горловинные и цилиндрически симметричные решения в общей теории относительности, создаваемые двумя фантомными скалярными полями с потенциальными слагаемыми 4-го, 6-го, 8-го порядка. Полученные численные решения представлены в виде графиков для функций  $\phi(x), \chi(x), a(x), A(r), B(r)$ . Показано, что для фантомной космической струны с параметрами  $\chi_0 = 0.7$  при  $\phi_0 = 1, \lambda_1 = 0,15, \lambda_2 = 1.1$  и с потенциальным слагаемым 4-го порядка решение не существует. Для доменной стенки в случае обычного ( $\varepsilon = +1$ ) скалярного поля с потенциальным

слагаемым 8-го порядка с параметрами  $\chi_0 = 0.7$  при  $\phi_0 = 1, \lambda_1 = 0,15, \lambda_2 = 1.1$  решения также не существуют. Это позволяет сделать вывод, что существование протяженных решений существенно зависит от вида потенциального слагаемого скалярных полей. Для каждой пары собственных значений  $m_1, m_2$  рассчитана плотность энергии доменной стенки, горловины, бозонной звезды и космических струн  $T_0^0$  и по полученным данным построена зависимость этой плотности от соответствующей координаты.

*Данная работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Республики Казахстан в рамках Гранта 0263/ПЦФ-14.*

### Литература

- 1 Dzhunushaliev V., Folomeev V., Makhmudov A., Urazalina A., Singleton D., and Scott J. Compact and extended objects from self-interacting phantom fields // Phys. Rev. D. – 2016. – Vol.94. P.024004.
- 2 Vilenkin A. and Shellard E.P.S. Cosmic Strings and Other Topological Defects. – Cambridge University Press, 2000.
- 3 Magueijo J. and Brandenberger R.H. Cosmic Defects and Cosmology // astro-ph/0002030.
- 4 Bazeia D., Boschi-Filho H. and Brito F.A. Domain defects in systems of two real scalar fields // JHEP. – 1999. – Vol. 9904. – P.028.

- 5 Santos C. Cosmic strings in axionic-dilatonic gravity // *Class.Quant.Grav.* – 2001. – Vol.18. – P. 1835-1846.
- 6 Bezerra de Mello E.R., Brihaye Y. and Hartmann B., Strings in de Sitter space // *Phys. Rev. D.* – 2003. – Vol. 67. – P.124008.
- 7 Cvetič M. and, Soleng H. H. Supergravity domain walls // *Phys.Rep.* – 1997. – Vol. 282. – P.159.
- 8 Berezin V.A., Kuzmin V.A., Tkachev I.I. // *Phys.Lett.B.* – 1983. – Vol.120. – P.91; Berezin V.A., Kuzmin V.A., Tkachev I.I. // *Phys.Rev. D.* – 1987. – Vol.36. – P. 2919; Garfinkle D., Vuille C. // *Class. Quant.Grav.* – 1989. – Vol.6. – P.1819; Ipsier J.R., Sikivie P. // *Phys.Rev. D.* – 1984. – Vol.30. – P.712; Laguna-Castillo P., Matzner R.A. // *Phys.Rev. D.* – 1986. – Vol.34. – P.2913.
- 9 Arodz H. // *Phys.Rev. D.* – 1995. – Vol.52. – P.1082; Arodz H., Larsen A.L. // *Phys.Rev. D.* – 1994. – Vol.49. – P.4154; Goetz G. // *J.Math.Phys.* – 1990. – Vol.31. – P.2683; Widrow L.M. // *Phys.Rev. D.* – 1989. – Vol.40. – P.1002.
- 10 Rajaraman R. *An Introduction to Solitons and Instantons in Quantum Field Theory.* – Amsterdam, New York, Oxford: North-Holland Publishing Company, 1982.
- 11 Bazeia D., dos Santos M.J. and Ribeiro R.F. // *Phys. Lett. A.* – 1995. – Vol. 208. – P.84; Bazeia D., Nascimento J.R.S., Ribeiro R.F., and Toledo D. // *J. Phys. A.* – 1997. – Vol.30. –P.8157; Bazeia D. and Gomes A.R. // *JHEP.* – 2004. – Vol.0405. –P.012; Vernov S.Y. // *Teor. Mat. Fiz.* – 2008. – Vol.155. – P.47 [Theor. Math. Phys. – 2008. – Vol.155. – P.544]; Aref'eva I.Y., Bulatov N.V., and Vernov S.Y. // *Theor. Math. Phys.* – 2010. – Vol. 163. – P. 788.
- 12 Dzhunushaliev V., Myrzakulov K., and Myrzakulov R. // *Mod. Phys. Lett. A.* – 2007. – Vol. 22. – P.273; Dzhunushaliev V., Folomeev V., Myrzakulov K., and Myrzakulov R. // *Mod. Phys. Lett. A.* – 2007. – Vol.22. – P.407.
- 13 Dzhunushaliev V. and Folomeev V. 4D Static solutions with interacting phantom fields// *Int. J. Mod. Phys. D.* – 2008. – Vol.17, No11. – P.2125-2142.
- 14 Dzhunushaliev V., Folomeev V., and Urazalina A. Star-plus-wormhole systems with two interacting scalar fields // *Int. J. Mod. Phys. D.* – 2015. – Vol. 24, No14. – P.14.
- 15 Dzhunushaliev V., Folomeev V., Myrzakulov K., and Myrzakulov R. Phantom fields: bounce solutions in the early universe and S-branes // *Int. J. Mod. Phys. D.* – 2008. – Vol.17, No12. – P.2351-2358.
- 16 Folomeev V. The Bianchi Type I Model With Two Interacting Scalar Fields // *Int. J. Mod. Phys. D.* – 2007. – Vol.16. – P.1845-1852.
- 17 Dzhunushaliev V. // *Grav. Cosmol.* – 2007. – Vol.13. – P.302; Dzhunushaliev V., Folomeev V., Singleton D., and Aguilar-Rudametkin S. // *Phys. Rev. D.* – 2008. – Vol.77. – P.044006; Dzhunushaliev V., Folomeev V., Myrzakulov K., and Myrzakulov R. // *Gen. Rel. Grav.* – 2009. – Vol.41. – P.131; Dzhunushaliev V., Folomeev V., and Minamitsuji M. // *Phys. Rev. D.* – 2009. – Vol. 79. – P.024001.

### References

- 1 V. Dzhunushaliev, V. Folomeev, A. Makhmudov, A. Urazalina, D. Singleton, and J. Scott, *Phys. Rev. D* 94, 024004, (2016).
- 2 A. Vilenkin and E.P.S. Shellard, *Cosmic Strings and Other Topological Defects*, Cambridge University Press (Cambridge, 2000).
- 3 J. Magueijo and R. H. Brandenberger, *Cosmic Defects and Cosmology*, astro-ph/0002030.
- 4 D. Bazeia, H. Boschi-Filho and F. A. Brito, , *JHEP* 9904, 028 (1999).
- 5 C. Santos, *Class.Quant.Grav.* 18, 1835-1846 (2001).
- 6 E.R. Bezerra de Mello, Y. Brihaye and B. Hartmann, *Phys. Rev. D*67, 124008 (2003).
- 7 M. Cvetič and, H. H. Soleng, *Phys.Rept.* 282, 159 (1997).
- 8 V.A. Berezin, V.A. Kuzmin, I.I. Tkachev, *Phys.Lett.* 120B, 91 (1983); V.A. Berezin, V.A. Kuzmin, I.I. Tkachev, *Phys.Rev.* D36, 2919 (1987); D. Garfinkle, C. Vuille, *Class.Quant.Grav.* 6, 1819 (1989); J.R. Ipsier, P. Sikivie, *Phys.Rev.* D30, 712 (1984); P. Laguna-Castillo, R.A. Matzner, *Phys.Rev.* D34, 2913 (1986).
- 9 H. Arodz, *Phys.Rev.* D52, 1082 (1995); H. Arodz, A.L. Larsen, *Phys.Rev.* D49, 4154 (1994); G. Goetz, *J.Math.Phys.* 31, 2683 (1990); L.M. Widrow, *Phys.Rev.* D40, 1002 (1989).
- 10 R. Rajaraman, *An Introduction to Solitons and Instantons in Quantum Field Theory* (North-Holland Publishing Company, Amsterdam, New York, Oxford, 1982).
- 11 D. Bazeia, M.J. dos Santos and R.F. Ribeiro, *Phys. Lett. A* 208, 84 (1995) [arXiv:hep-th/0311265]; D. Bazeia, J. R. S. Nascimento, R. F. Ribeiro, and D. Toledo, *J. Phys. A* 30, 8157 (1997); D. Bazeia and A. R. Gomes, *JHEP* 0405, 012 (2004); S. Y. Vernov, *Teor. Mat. Fiz.* 155, 47 (2008) [Theor. Math. Phys. 155, 544 (2008)]; I. Y. Aref'eva, N. V. Bulatov, and S. Y. Vernov, *Theor. Math. Phys.* 163, 788 (2010).
- 12 V. Dzhunushaliev, K. Myrzakulov, and R. Myrzakulov, *Mod. Phys. Lett. A* 22, 273 (2007); V. Dzhunushaliev, V. Folomeev, K. Myrzakulov, and R. Myrzakulov, *Mod. Phys. Lett. A* 22, 407 (2007).
- 13 V. Dzhunushaliev and V. Folomeev, *Int. J. Mod. Phys. D* 17, 2125 (2008).
- 14 V. Dzhunushaliev, V. Folomeev, and A. Urazalina, *Int. J. Mod. Phys. D* 24, 14 (2015).
- 15 V. Dzhunushaliev, V. Folomeev, K. Myrzakulov, and R. Myrzakulov, *Int. J. Mod. Phys. D* 17, 2351 (2008).
- 16 V. Folomeev, *Int. J. Mod. Phys. D* 16, 1845 (2007).
- 17 V. Dzhunushaliev, *Grav. Cosmol.* 13, 302 (2007); V. Dzhunushaliev, V. Folomeev, D. Singleton, and S. Aguilar-Rudametkin, *Phys. Rev. D* 77, 044006 (2008); V. Dzhunushaliev, V. Folomeev, K. Myrzakulov, and R. Myrzakulov, *Gen. Rel. Grav.* 41, 131 (2009); V. Dzhunushaliev, V. Folomeev, and M. Minamitsuji, *Phys. Rev. D* 79, 024001 (2009).



4-бөлім  
**ЖОҒАРЫ ОҚУ ОРНЫНДА  
ФИЗИКАНЫ ОҚЫТУ ӘДІСТЕМЕСІ**

---

Раздел 4  
**МЕТОДИКА ПРЕПОДАВАНИЯ  
ФИЗИКИ В ВЫСШЕЙ ШКОЛЕ**

---

Section 4  
**METHODS OF TEACHING HIGH  
SCHOOL PHYSICS**

Жусупов М.А., Жусупов А.М.,  
Кабатаева Р.С.,  
Жаксыбекова К.А.

**Методика расчета  
характеристик экзотических  
атомов**

В настоящей статье рассматривается методика расчета характеристик экзотических атомов, которая окажется весьма полезной для молодых преподавателей и исследователей в области теоретической ядерной физики. Рассматриваются водородоподобные системы, приводятся основные формулы для расчета характеристик таких систем. Приведены примеры расчета характеристик для таких систем как мезоатомы, позитроний, мюоний, протоний и пионий, в которых доминирующим является кулоновское взаимодействие, поскольку ядерные силы являются короткодействующими. Максимум действия ядерных сил приходится на расстояние в несколько ферми, тогда как соответствующие боровские радиусы значительно больше. На этих расстояниях ядерные силы малы и протоний и пионий являются по существу чисто кулоновскими системами. Для указанных систем детально рассчитаны значения энергии ионизации и боровского радиуса с использованием постоянной конверсии и постоянной тонкой структуры. Теоретический расчет характеристик для протония и пиония, используя формулы для кулоновских систем, находится в хорошем согласии с экспериментальными значениями. Приведена краткая справка о методе нахождения масс дейтрона и тритона, используя изотопический сдвиг спектральных линий изотопов водорода – дейтерия и трития.

**Ключевые слова:** экзотические атомы, водородоподобные системы, мезоатомы, позитроний, мюоний, протоний, пионий, энергия ионизации, боровский радиус.

Zhusupov M.A., Zhusupov A.M.,  
Kabatayeva R.S.,  
Zhaksybekova K.A.

**Methodology of calculation of  
characteristics of exotic atoms**

In the present article the methodology of calculation of characteristics of exotic atoms is considered, it will be of use for young teachers and researchers in the field of theoretical nuclear physics. The hydrogen-like systems are considered, the main formulas for calculation of characteristics of such systems are given. The examples of calculation of characteristics of such systems as mesoatoms, positronium, muonium, protonium and pionium are shown. In such systems the dominating role is for the Coulomb interaction since the nuclear forces are short-range ones and the maximum of nuclear forces' action is for a distance of order of several fermi but the Bohr radii are considerably larger. At these distances the nuclear forces are weaker and the protonium and pionium are essentially Coulomb systems. For the mentioned systems there is a detailed calculation of energy of ionization and the Bohr radius using the conversion constant and the fine structure constant. The theoretical calculation for the protonium and pionium using the formulas for the Coulomb systems is in good agreement with the experimental data. The brief description of the method of determination of the mass of deuteron and triton is given, using the isotopic shift of the spectral lines of hydrogen isotopes – deuterium and tritium.

**Key words:** exotic atoms, hydrogen-like systems, mesoatoms, positronium, muonium, protonium, pionium, ionization energy, Bohr radius.

Жүсіпов М.Ә., Жүсіпов А.М.,  
Қабатаева Р.С.,  
Жақсыбекова К.А.

**Экзотикалық атомдардың  
сипаттамаларын есептеу  
әдіснамасы**

Бұл мақалада экзотикалық атомдардың сипаттамаларын есептеу әдіснамасы қарастырылған, теориялық ядролық физикасының жас оқытушыларына және зерттеушілеріне аса пайдалы болады. Сүтегі тәрізді жүйелер қарастырылады, сондай жүйелердің сипаттамаларын есептеудің негізгі формулалары келтірілген. Мезоатомдар, позитроний, мюоний, протоний және пионий сияқты жүйелердің сипаттамаларын есептеу мысалдары берілген. Мұндай жүйелерде кулондық әсерлесу доминантты болып табылады себебі ядролық күштер қысқа әсерлі және ядролық күштердің әсер ету максимумы бір неше ферми ретімен орындалса, сәйкесті бор радиустары аса ғұрлым үлкенірек. Бұл қашықтықта ядролық күштер кіші болады және де протоний мен пионий шын мәнінде таза кулондық жүйелер болып табылады. Айтылған жүйелер үшін конверсия тұрақтысын және жіңішке құрылым тұрақтысын қолданып иондау энергиясы және бор радиусының мәндері есептелді. Кулондық жүйелердің формулаларын қолданып протоний және пионий үшін жасалған сипаттамалардың теориялық есептеуі эксперименттік мәндермен жақсы келісімде. Сүтегі изотоптары дейтерий және тритийдің спектралдық сызықтарының изотоптық шөгуді қолданып дейтронның және тритонның массаларын анықтау әдісі туралы қысқаша сипаттама берілген.

**Түйін сөздер:** экзотикалық атомдар, сүтегі тәрізді жүйелер, мезоатомдар, позитроний, мюоний, протоний, пионий, иондау энергиясы, бор радиусы.

**МЕТОДИКА РАСЧЕТА  
ХАРАКТЕРИСТИК  
ЭКЗОТИЧЕСКИХ  
АТОМОВ****Введение**

Водородоподобными называют атомы, в электронной оболочке которых содержится только 1 электрон. К ним относят атом водорода, ядром которого является протон; однократно ионизированный атом гелия  $He^+$ , двукратно ионизированный атом  $Li^{++}$  и т.д., то есть одноэлектронные системы с зарядом  $+2e$ ,  $+3e$ .

В последнее время были открыты так называемые «экзотические» атомы – мезоатомы, позитроний, мюоний, протоний и пионий. Каждая из этих систем имеет свои особенности, но общим является то, что доминирующим взаимодействием, образующим эти системы, как и в атоме водорода, является кулоновское.

Впервые водородоподобные атомы были рассмотрены Н.Бором в полуквантовой теории [1]. Согласно классической физике, заряженная частица, движущаяся по криволинейной траектории, должна излучать энергию. Вследствие этого энергия частицы будет непрерывно уменьшаться. В действительности же электроны в атоме могут двигаться вокруг ядра сколь угодно долго без излучения энергии. Более того энергия электронов в атоме может изменяться только вполне определенными порциями. Для объяснения этих фактов Бор предложил 2 постулата:

1. Атомы могут находиться длительное время только в определенных, так называемых стационарных состояниях. Энергии этих стационарных состояний образуют дискретный ряд значений  $E_1, E_2, \dots, E_n$ .

2. При переходе атома из начального стационарного состояния  $E_n$  в другое  $E_m$  ( $E_m < E_n$ ) излучается квант света, причем частота излучения  $\omega = \frac{E_n - E_m}{\hbar}$ .

Квантование в теории Бора вводилось искусственно. Предполагалось, что электрон движется вокруг ядра по круговой орбите радиуса  $r$ . Кулоновская сила притяжения является центростремительной. К этому условию добавляется условие квантования стационарных орбит

$$\frac{m_e v^2}{r} = \frac{z e^2}{r^2}, \quad (1)$$

$$m_e v r = n \hbar, \quad (2)$$

где  $\hbar$  – постоянная Планка  $h$ , деленная на  $2\pi$ . Квантовое число  $n$  принимает значения  $n = 1, 2, 3, \dots$ . Решая уравнения (1) и (2), находим  $r_n$  и  $v_n$ . Затем находится полная энергия как сумма кинетической и потенциальной энергий

$$E_n = \frac{m_e v_n^2}{2} - \frac{z e^2}{r_n}. \quad (3)$$

В результате получим формулу Бальмера для квантования энергетических уровней водородоподобного атома

$$E_n = -\frac{m_e z^2 e^4}{2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad (4)$$

и радиуса стационарных орбит

$$r_n = n^2 \frac{\hbar^2}{z m_e e^2}. \quad (5)$$

Особый интерес представляют эти величины для основного состояния атома водорода ( $z = 1, n = 1$ ):  $\varepsilon_1 = E_1$  и  $a = r_1 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}$ . Более

строго формулы (4) и (5) выводятся в квантовой механике. Так, в теории Бора оговаривается, что  $n \neq 0$ . Но строгая теория должна объяснять значения всех составляющих ее параметров. В квантовой механике значение  $n = 0$  исключается автоматически.

На эксперименте измеряют энергию ионизации  $J_1 = -\varepsilon_1$  и радиусы боровской орбиты. Энергия ионизации – это энергия, необходимая для отрыва электрона от атома. Радиус боровской орбиты – в теории Бора это расстояние от протона, на котором движется электрон. В квантовой механике величина  $a$  – это расстояние, на котором максимальна вероятность обнаружения электрона. Это наивероятное зна-

чение координаты. В принципе, согласно квантовой механике, электрон в атоме можно обнаружить на любом расстоянии от протона.

Отметим, что все формулы для водородоподобных атомов получены в предположении покоящегося ядра. Действительно, из-за сохранения импульса кинетические энергии частиц в атоме водорода обратно пропорциональны их массам, то есть для атома водорода  $\frac{T_p}{T_e} = \frac{m_e}{m_p} = \frac{1}{1836}$  и протон можно считать

неподвижным. Можно показать, что учет движения ядра сводится к замене массы электрона  $m_e$  на приведенную массу  $\mu_{ep}$ . Она

определяется как  $\frac{1}{\mu_{ep}} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_p}$ , то есть

$$\mu_{ep} = \frac{m_e \cdot m_p}{m_e + m_p} \approx m_e \left( 1 - \frac{m_e}{m_p} \right).$$

Особенно интересно этот эффект проявляется в изотопическом сдвиге спектральных линий. Изотопами называют элементы, заряд ядра в которых одинаков, но массы различны. Известны изотопы водорода – дейтерий и тритий. Ядро атома дейтерия, называемое дейтроном, состоит из протона и нейтрона. Ядро атома трития, называемое тритоном, состоит из протона и 2 нейтронов. Различие в массах ядер различных изотопов приводит к сдвигу линий друг относительно друга в их спектрах излучения. Этот сдвиг линий называется изотопическим. Величина этого сдвига незначительна (для частот  $\square \omega \square 10^{-4}$ ), но точность спектроскопических приборов достаточна, чтобы его установить. Именно по изотопическому сдвигу были найдены массы дейтрона и тритона, а по относительной интенсивности сдвинутых линий судят о концентрации изотопов. Именно так было установлено, что в обычной воде один атом дейтерия приходится на пять с половиной тысяч атомов водорода. Вообще все без исключения элементы представляют собой смесь изотопов. Некоторые из них состоят в основном из одного стабильного изотопа. Водород с массовым числом 1 занимает 99,986%, остальное приходится на дейтерий. На кислород с массовым числом 16 приходится 99,76%. Встречаются элементы, которые содержат разные изотопы в сравнимых количествах. Например, хлор содержит 75%

изотопа с массовым числом 35 и 25% с массовым числом 37. Разделение изотопов является важной отраслью атомной промышленности. Необходимо отделить тяжелую воду от обычной, выделять определенные изотопы урана и тория, являющиеся ядерным горючим. Методы, использующие различие масс изотопов, являются исключительно дорогостоящими и требуют больших затрат времени. Более эффективными являются методы, использующие небольшое различие в энергетических спектрах от атомов изотопов. Лазерные лучи обладают строго определенной энергией. Настраиваемые на энергию возбужденного состояния определенного изотопа лазерные лучи переводят атомы в возбужденное состояние. В то же время атомы других изотопов остаются невозбужденными. Но возбужденные атомы, погло-

тившие фотон, приобретают дополнительный импульс в направлении лазерного луча и будут смещаться. На этом основан метод лазерного разделения изотопов.

Далее рассмотрено применение простой теории водородоподобных атомов к расчету основных характеристик более сложных систем, открытых сравнительно недавно и названных экзотическими атомами.

### Расчет характеристик

В микромире удобно, используя соотношение Эйнштейна  $E = mc^2$ , измерять массы в энергетических единицах – мегаэлектронвольтах (МэВ). 1 МэВ =  $10^6$  электронвольт (эВ). Так, для электрона  $m_e \cdot c^2 = 0.511$  МэВ. В таблице приведены массы ( $m \cdot c^2$ ) некоторых частиц, которые будут использованы в дальнейшем [1].

Таблица – Массы частиц в МэВ

Частица	$p$ (протон)	$n$ (нейтрон)	$e^\pm$ (электрон и позитрон)	$\mu^\pm$ (мю-мезоны)	$\pi^\pm$ (пи-мезоны)
$m \cdot c^2$ (МэВ)	938,27	939,57	0,511	105,658	139,658

Все расчетные формулы упрощаются, если также использовать 2 константы: постоянную тонкой структуры  $\frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}$  и так называемый коэффициент конверсии  $\hbar \cdot c = 1,97 \cdot 10^{-11}$  МэВ·см. Например, энергия основного состояния атома водорода

$$E_1 = -\frac{m_e \cdot e^4 \cdot c^2}{2\hbar^2 \cdot c^2} = -\frac{(m_e \cdot c^2)}{2} \cdot \left(\frac{e^2}{\hbar \cdot c}\right)^2 = -13,6 \text{ эВ}$$

Энергия ионизации равна  $J = 13.6$  эВ. Для боровского радиуса получим

$$a = \frac{\hbar^2 \cdot c^2}{m_e \cdot e^2 \cdot c^2} = \frac{\hbar \cdot c}{m_e \cdot c^2} \cdot \left(\frac{\hbar \cdot c}{e^2}\right) \approx 0,528 \cdot 10^{-8} \text{ см}$$

Рассмотрим экзотические атомы.

1. Мезоатомы. Так называются атомы, в которых один электрон вытеснен  $\mu^-$  или  $\pi^-$ -мезоном. Так, для мезоводорода, состоящего из  $\mu^-$ -мезона и протона, приведенная масса

$$\mu_{\text{мез.}} = \frac{105,66 \cdot 938,27}{105,66 + 938,27} = 94,966 \text{ МэВ}$$

$\approx 186 m_e \cdot c^2$ . Отсюда, энергия ионизации  $J_{\text{мез.}} = 13,6 \cdot 186 = 2530$  эВ. Радиус боровской орбиты в 186 раз меньше, чем для водорода  $a \approx 2,84 \cdot 10^{-11}$  см.

Хотя мю-мезоатом более компактная система и его энергия связи на 2 порядка больше, чем у атома водорода, в природе он практически не встречается. Это связано с малым временем жизни  $\tau = 2,2 \cdot 10^{-6}$  секунды. Даже если бы он двигался со скоростью света, то его пробег составил примерно 660 метров. В дальнейшем мы покажем, как может быть увеличено время жизни  $\mu^-$ -мезона.

2. Позитроний. Так называется водородоподобная система, состоящая из электрона  $e^-$  и позитрона  $\mu^+$ . Позитрон является античастицей по отношению к электрону; массы их

совпадают, а заряды противоположны по знаку. Приведенная масса позитрония ровно в 2 раза меньше массы электрона. Поэтому потенциал ионизации мю-мезоводорода в 2 раза меньше  $J_{\text{мез.}} = 3,8$  эВ, а радиус боровской орбиты в 2 раза больше  $a_{\text{ноз.}} = 2a_{\text{вод.}}$ . Электрон и позитрон имеют собственные моменты количества движения – спины  $s = \frac{1}{2}$ . В атоме позитрония спины

их могут быть параллельными и суммарный спин  $S = 1$ . Такая система называется ортопозитронием. Если спины антипараллельны, то  $S = 0$ . Эта система называется парапозитронием. Время жизни ортопозитрония  $\tau = 1.4 \cdot 10^{-7}$  секунды, а парапозитрония –  $\tau = 1.25 \cdot 10^{-10}$  секунды. Позитроний распадается, превращаясь в 2 или 3 гамма-кванта  $e^+ + e^- \rightarrow 2\gamma$  или  $3\gamma$ . Этот процесс называется аннигиляцией электрон-позитронной пары. При этом парапозитроний распадается на 2 гамма-кванта, а ортопозитроний – в основном на 3 гамма-кванта.

3. Мюоний. Состоит из положительного  $\mu^+$ -мезона и электрона. Мюон аналогичен по свойствам позитрону, но имеет массу в 207 раз большую. Приведенная масса мюония почти равна приведенной массе атома водорода. Поэтому боровский радиус и потенциал ионизации мюония практически совпадают с соответствующими величинами для атома водорода.

4. Протоний. Представляет из себя связанное состояние протона  $p$  и антипротона  $\bar{p}$ . Масса антипротона равна массе протона, а заряд отрицательный  $-e$ . Недавно были получены экспериментальные данные по энергии ионизации и боровскому радиусу протония:  $J_{\text{прот.}} = 12,5$  кэВ ( $1 \text{ кэВ} = 10^3$  эВ),  $a_{\text{прот.}} = 57,6$  фм,  $1 \text{ фм} = 1 \text{ ферми} = 10^{-13}$  см – основная единица длины в ядерной физике.

Теоретические значения:

$$J_{\text{прот.}} = \frac{\mu_{\text{прот.}} \cdot e^4 \cdot c^2}{2\hbar^2} = \frac{938,27 \text{ МэВ}}{4 \cdot 137^2} \approx 12,49 \text{ МэВ.}$$

$$a_{\text{прот.}} = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} = \frac{2}{m_p c^2} \cdot \frac{\hbar c \cdot \hbar c}{e^2} \approx 57,53 \text{ фм.}$$

5. Пионий. Представляет из себя связанное состояние  $\pi^+ \pi^-$ -мезонов. Недавно измеренные экспериментальные значения:  $J_{\text{пион.}} = 1,86$  кэВ,  $a_{\text{прот.}} = 386$  фм. Теоретические значения:

6.

$$J_{\text{пион.}} = \frac{m_{\pi} c^2}{2 \cdot 2} \left( \frac{e^2}{\hbar c} \right)^2 = \frac{139,658 \text{ МэВ}}{4 \cdot 137^2} = 1,8602 \text{ кэВ,}$$

$$a_{\text{пион.}} = \frac{\hbar^2 c^2}{\mu c^2 e^2} = \frac{2 \cdot 137 \cdot 1,97 \cdot 10^{-11} \text{ МэВ} \cdot \text{см}}{139,658 \text{ МэВ}} = 386,50 \text{ фм.}$$

Связь системы СИ (SI) и СГС (CGSE) осуществляется с помощью умножения заряда

на константу  $\frac{1}{\sqrt{4\pi\epsilon_0}}$ , где  $\epsilon_0$  – диэлектрическая

постоянная. Заряд в СГС-системе определяется

как  $e = \frac{q}{\sqrt{4\pi\epsilon_0}}$ , где  $q$  – заряд в СИ-системе,

тогда  $e^2 = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0}$  и  $\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} = \frac{1}{137}$  –

постоянная тонкой структуры.

### Заключение

Согласие экспериментальных значений для потенциалов ионизации и боровских радиусов с теоретическими, полученными для водородоподобных систем, удивительно хорошее. Дело в том, что когда экспериментальные значения еще не были получены, некоторые физики предполагали, что поскольку основное взаимодействие между протонами и антипротонами и  $\pi^+ \pi^-$ -мезонами сильное (ядерное), то простые кулоновские формулы будут давать слишком грубую оценку. Как видим, опасения эти оказались напрасными. Связано это с короткодействующим характером ядерных сил. Максимум их приходится на расстояние в несколько ферми, тогда как соответствующие боровские радиусы значительно больше. На этих расстояниях ядерные силы малы и протоний и пионий

являются по существу чисто кулоновскими системами.

В заключение хотелось бы отметить, что в последнее время в ядерной физике широкое распространение получили так называемые *экзотические ядра* [2]. Это нестабильные ядра,

состоящие из протонов и нейтронов, однако соотношение между ними сильно отличается от того же для стабильных ядер. Взаимодействие между ними сильное (ядерное). В настоящее время разработаны специальные методы для получения и исследования подобных ядер.

#### Литература

- 1 Матвеев А.Н. Атомная физика. – М.: Высшая школа, 1989. – 439 с.
- 2 Жусупов М.А., Юшков А.В. Физика атомных ядер. Том 3. – Алматы, 2007. – 736 с.

#### References

- 1 A.N. Matveyev, Atomnaya fizika, M.: Vysshaya shkola, 1989. 439 s. (in russ).
- 2 M.A. Zhusupov, A.V. Yushkov. Fiziks atomnyh yader. Tom 3. Almaty 2007. 736s. (in russ).

Бошқаев Қ.А., Жәми Б.А.,  
Қалымова Ж.А.

**Ақ ергежейлі жұлдыздардың  
негізгі параметрлерін  
анықтауда Wolfram  
Mathematica бағдарламасын  
қолдану**

Жұмыста ақ ергежейлі жұлдыздардың негізгі параметрлерін теориялық тұрғыда есептеуде Wolfram Mathematica бағдарламасын қолдану әдістемесі қарастырылған. Статикалық суық (температурасы нөлге тең) ақ ергежейлі жұлдыздардың негізгі параметрлері масса, радиус және тығыздық классикалық физика аясында есептелді. Бұл параметрлерді анықтау үшін Ньютондық гидростатикалық тепе-теңдік теңдеуі, массаның баланс және айныған электрондық газдың күй теңдеулерінен құралған жүйе шешілді. Теңдеулердің аналитикалық шешімдері жоқ болғандықтан, сандық шешімдері, Wolfram Mathematica жүйесінде арнайы бағдарлама жазылып, алынды. Алынған сандық шешімдер арқылы ақ ергежейлі жұлдыздың негізгі параметрлері анықталып, масса-радиус, масса-орталық тығыздық, радиус-орталық тығыздық қатынастары тұрғызылды. Есептеулердің барлығы үлгі ретінде ергежейлі әдістемелік нұсқаулықтармен көрсетілді. Жұмыс жоғарғы оқу орындарындағы физика, физика және астрономия мамандықтарының студенттері, магистранттары, докторанттары мен жас мамандарға арналған.

**Түйін сөздер:** Wolfram Mathematica, ақ ергежейлі жұлдыздар, айныған электрондық газ күй теңдеуі, гидростатикалық тепе-теңдік теңдеуі, массаның баланс теңдеуі.

Boshkayev K.A., Zhami B.A.,  
Kalymova Zh.A.

**Application of Wolfram  
Mathematica program to the  
determination of the main  
parameters of white dwarf stars**

In this work the application methodology of Wolfram Mathematica program is considered in order to calculate the basic characteristics of white dwarf stars. The main quantities of static cold (zero temperature) white dwarfs such as the mass, radius, and density have been determined within the framework of classical physics. To determine these parameters the system, consisting of the differential equations such as the Newtonian equation of hydrostatic equilibrium, the mass balance equation and the equation of state of the degenerate electron gas, has been solved. These equations cannot be solved analytically, and therefore a special code has been written for solving the equations numerically. In terms of the numerical solutions the main parameters of white dwarfs have been computed and the mass-radius, mass-central density, radius-central density relations have been constructed. All calculations are shown in detail with methodological instructions as an example. The work is dedicated to the undergraduate, graduate, PhD students and young experts of higher educational institutions of specialties physics, physics and astronomy.

**Key words:** Wolfram Mathematica, white dwarf stars, equation of state degenerate electron gas, equation of hydrostatic equilibrium, equation of mass balance.

Бошкаев К.А., Жами Б.А.,  
Калымова Ж.А.

**Применение программы  
Wolfram Mathematica  
для определения основных  
параметров белых карликов**

В работе рассматривается методика использования программы Wolfram Mathematica для вычисления основных параметров белых карликов. Основные параметры статических холодных (с нулевой температурой) белых карликов такие как масса, радиус и плотность были определены в рамках классической физики. Для определения этих параметров была решена система, состоящая из дифференциальных уравнений гидростатического равновесия Ньютона, баланса массы и уравнения состояния вырожденного электронного газа. Данные уравнения не решаются аналитическим путем и поэтому была написана специальная программа для решения уравнений численно. Посредством численного решения были определены основные параметры белых карликов и построены соотношения масса-радиус, масса-центральная плотность, радиус-центральная плотность. Все расчеты показаны подробно методическими инструкциями в качестве примера. Работа посвящена студентам, магистрантам, докторантам и молодым специалистам высшего учебного заведения по специальностям физика, физика и астрономия.

**Ключевые слова:** Wolfram Mathematica, белые карлики, уравнение состояния вырожденного электронного газа, уравнение гидростатического равновесия, уравнение баланса массы.



**АҚ ЕРГЕЖЕЙЛІ  
ЖҰЛДЫЗДАРДЫҢ  
НЕГІЗГІ  
ПАРАМЕТРЛЕРІН  
АНЫҚТАУДА WOLFRAM  
MATHEMATICA  
БАҒДАРЛАМАСЫН  
ҚОЛДАНУ**

**Кіріспе**

Бүкіл әлемде 25 жылдан астам уақыттан бері студенттер, оқытушылар және тағы да басқа қолданушылар үшін Mathematica таптырмас жүйе болып келеді. Wolfram Mathematica – компьютерлік, инженерлік, математика, химия, биология, генетика, әлеуметтану және т.б. түрлі ғылым салаларында қолданылатын компьютерлік алгебраның жүйесі. Бұл жүйенің негізін қалаған Стивен Вольфрам. Қазіргі уақытта бұл бағдарламаны Wolfram Research компаниясы жетілдіру үстінде. Жылдан жылға бағдарламаның мүмкіншілігі артып келеді. Бағдарламаны қолдану ыңғайлы, әрі техникалық мүмкіндігі өте жоғары. Mathematica-ның қазіргі таңда 5000-ға жуық функциясы бар. Техникалық есептеулер, соның ішінде мәліметтерді өңдеу, математикалық және алгебралық есептеулер, аналитикалық түрлендірулер, сандық есептер, графиктер мен дыбыс, суреттерді өңдеу және т.б. мүмкіншіліктері бар. 2016 жылы Mathematica жүйесінде ресми түрде тіркелген қолданушылар саны 2 миллионнан асты. Сонымен қатар студенттер үшін, жалпы қолданушылар үшін арнайы Mathematica бағдарламасын: қалай қолдану, мағлұматтарды қалай енгізу қажеттігін үйретуге арналған көптеген әдебиеттер бар [1-3].

Бүгінгі күнде жоғарғы оқу орындарында, түрлі ғылым салаларында есептеулер жүргізуде компьютерлік бағдарламаларды қолдану кең етек жаюда. Соның ішінде әсіресе Wolfram Mathematica бағдарламасы көп қолданылады. Жоғарғы оқу орындарындағы техникалық мамандықтарда әртүрлі пәндер оқытылады. Мысалы, физика мен астрономия мамандықтарының студенттеріне жалпы физика курсы, теориялық физика курстары, астрономия және астрофизика пәндері бойынша дәріс, семинар және лабораториялық сабақтар өтіледі. Осы пәндерді оқыту барысында кейбір есептеулер аналитикалық жолмен шешілмейді. Осындай жағдайда оларды сандық әдістерді пайдаланып шығару қажеттігі туындайды. Міне осындай есептеулерді Mathematica жүйесінде шығару өте ыңғайлы.

Жұмыстың мақсаты, жоғарғы оқу орындағы студенттерге Wolfram Mathematica бағдарламасының көмегімен ақ ергежейлі жұлдыздардың негізгі параметрлерін есептеу әдістемесін үлгі ретінде көрсету. Ал, өз кезегінде, ақ ергежейлі (АЕ) жұлдыз дегеніміз – массасы Күннің массасына жуық, орташа массасы  $0,65 M_{\odot}$ , термоядролық синтезге жарамсыз, әрі өзінің жылулық қорының есебінен жарық шығаратын шағын жұлдыз. Оның орташа радиусы 10000 км, орташа тығыздығы  $10^6$  г/см<sup>3</sup>. Ақ ергежейлі жұлдыздың қарапайым жұлдыздан негізгі айырмашылықтарының бірі – АЕ жұлдызды гравитациялық коллапсқа жеткізбей ұстап тұратын айныған электронды газдың қысымы [4, 5, 6]. Ал екінші бір ерекшелігі – оның өлшемінің кіші болатындығында. Қарапайым жұлдыздарда масса артқан сайын, радиус артатын болса, ал АЕ жұлдыздарда радиус кішірейте түседі. Бұл сәйкесінше гравитациялық өрістің күшейетінін көрсетеді. 2015 жылға дейін, ақ ергежейлі жұлдыздардың саны 9316-ға жетті, ал 2015 жылғы бақыланған деректер бойынша жұлдыздардың саны қосымша 6576-ға толықтырылып, 2016 жылы барлығы 32000 ақ ергежейлі жұлдыз тіркелді [7, 8].

Ақ ергежейлі жұлдыздарды зерттеудің маңыздылығы орасан зор. Өйткені қазіргі таңда астрофизиканың космологияға қатысты бірнеше мәселелері бар. Соның бірі космологиялық арақашықтықтарды анықтауға мүмкіндік беретін Ia типті асқын жаңа жарылыс. Ал бұл жарылыстар ақ ергежейлі жұлдыздардың жарылуы салдарынан пайда болады. Астрономдар Ia типті асқын жаңа жарылысты Әлемнің үдемелі ұлғаю жылдамдығын анықтау мақсатында пайдаланады. Сонымен қатар, АЕ-нің біркелкі таралуы жұлдыздардың құрылымы және олардың біздің Галактикадағы эволюциясы туралы мәліметтерді қамтиды. Ақ ергежейлілер бас тізбектегі жұлдыздардың эволюциясының өте кең таралған өнімі бола отырып, барлық эволюцияланған жұлдыздардың шамамен 97 пайызын құрайды.

Ақ ергежейлілер бақыланбайтындай болып суып үлгеруі үшін жеткілікті уақыт өткен жоқ. Егер осы жайтты назарға алатын болсақ, онда олар біздің Галактиканың жасы туралы тәуелсіз мәліметтерді бере алады. Бастапқы және соңғы массалардың арақатынастарының көмегімен біз жұлдыз эволюциясы кезінде заттың шығынын зерттей аламыз. Ақ ергежейлілердің арғы тектері көміртегі, азот және оттегіні бас тізбектегі жұлдыз кезеңінде жоғалтады, олар біздің Галак-

тиканың химиялық эволюциясына айтарлықтай үлес қосады және тіршіліктің пайда болуына жағдай жасайтын химиялық байланыстардың құрылуы үшін маңызды бастау болып табылады [9]. Сондықтан да, ақ ергежейлі жұлдыздарды зерттеу өте маңызды болып табылады.

Жұмыстың бірінші бөлімінде классикалық физикадағы массаның баланс және гидростатикалық тепе-теңдік теңдеулері; екінші бөлімде айныған электрондық газдың күй теңдеуі; үшінші бөлімде теңдеулерді өлшемсіз түрге келтіру жолдары; төртінші бөлімде шекаралық шарттар; бесінші бөлімде АЕ жұлдыздардың негізгі параметрлерін анықтауда шағын бағдарламалық кешен; алтыншы бөлімде жұмыстың нәтижесі қорытындыланды.

*Массаның баланс және гидростатикалық тепе-теңдік теңдеулері*

Айналмайтын жұлдыздардың тепе-теңдік конфигурацияларын тұрғызу үшін ең алдымен құрылым теңдеулерін жазып алу қажет. Әдебиетте бұл теңдеулер массаның баланс және қысымға қатысты гидростатикалық тепе-теңдік теңдеуі деп аталады [11]. Бұл теңдеулер келесі түрде беріледі:

$$\begin{cases} \frac{dm(r)}{dr} = 4\pi r^2 \rho(r) \\ \frac{dP(r)}{dr} = -\rho(r) \frac{\gamma m(r)}{r^2}, \end{cases} \quad (1)$$

мұндағы,  $\gamma$  – гравитациялық тұрақты,  $\rho(r)$  – жұлдыз затының тығыздығы,  $m(r)$  – радиусы  $r$  мен шектелген сфераның массасы,  $P(r)$  – жұлдыз ішіндегі қысым,  $r$  – радиал координат.

Теңдеулерді шешу үшін бізге қысым мен тығыздық арасындағы байланысты көрсету қажет. Бұл байланысты көрсететін өрнек жұлдыз затының күй теңдеуі деп аталады. Ол аналитикалық өрнек түрінде, болмаса эмпирикалық кесте түрінде берілуі мүмкін. Жалпы жағдайда күй теңдеуіне заттың температурасы, заттың құрамындағы бөлшектердің әсерлесу энергиялары т.б. кіреді. Біздің жағдайда суық ақ ергежейлі жұлдыздар үшін күй теңдеуі айныған электрондық газдың тығыздығы мен қысымы арқылы анықталады.

*Айныған электрондық газдың күй теңдеуі*

Статистикалық физикада кванттық газдардың екі түрі бар. Егер кванттық (айныған) газдың құрамына кіретін бөлшектердің спині

жартылай бүтін болса, олар фермиондар деп аталады және олардан тұратын газдар Ферми-Дирак статистикасымен сипатталады. Егер бөлшектердің спині бүтін болса, бөлшектер бозондар деп аталады, сәйкесінше олардан тұратын газдар Бозе-Эйнштейн статистикасымен анықталады. Ақ ергежейлі жұлдыздар мен нейтрондық жұлдыздар Ферми-Дирак статистикасымен сипатталатын айныған газдардан тұрады. Ал осы күнге дейін Бозе-Эйнштейн

статистикасымен анықталатын жұлдыздар теориялық тұрғыда қарастырылғанмен, бақылау арқылы тіркелген жоқ. Тек температура нөлге жуық кезде Бозе-конденсат деп аталатын заттың бесінші күйі ретінде зертханаларда алынды [5, 10].

Чандрасекар жуықтауы бойынша ақ ергежейлі жұлдызда заттың тығыздығы иондардың тығыздығымен өрнектелсе, ал қысымы айныған электрондық газдың қысымымен сипатталады:

$$\begin{cases} \rho(r) = \frac{\varepsilon(r)}{c^2} = \frac{32}{3} \left(\frac{m_e}{m_n}\right)^3 \frac{K_n}{c^2} \left(\frac{A}{Z}\right) y^3(r) \\ P(r) = \frac{4}{3} \left(\frac{m_e}{m_n}\right)^4 K_n \left[ y(r) (2y^2(r) - 3) \sqrt{1 + y^2(r)} + 3 \ln(y(r) + \sqrt{1 + y^2(r)}) \right] \end{cases} \quad (2)$$

мұндағы,  $\rho(r)$  – айныған газдың құрамына кіретін иондардың тығыздығы,  $\varepsilon(r)$  – иондардың энергия тығыздығы,  $c$  – жарықтың вакуумдегі жылдамдығы,  $P(r)$  – айныған электрондық газдың қысымы,  $m_e$  – электронның массасы,  $m_n$  – нуклонның массасы,  $K_n = m_n^4 c^5 / 32\pi^2 \hbar^3$ ,  $\hbar$  – келтірілген Планк тұрақтысы,  $y(r) = p_e(r) / m_e c$  – электронның өлшемсіз Ферми импульсі,  $A$  – атомдық масса,  $Z$  – протондардың саны. (2) формулада қысым мен тығыз электронның өлшемсіз Ферми импульсі арқылы байланысқан. Осыны есептеулерді орындаған кезде ескеру қажет.

Жоғарыдағы жуықтауда, ақ ергежейлі жұлдыздер негізінен көміртегі  $^{12}_6\text{C}$ , оттегі  $^{16}_8\text{O}$  және магний  $^{24}_{12}\text{Mg}$  сияқты  $A/Z = 2$  болатын элемен-

терден тұрады және электрлік бейтарап деп есептелінеді [5]. Осыған орай, біз де  $A/Z = 2$  деп аламыз.

*Теңдеулерді өлшемсіз түрге келтіру*

Сандық есептеулерді орындау барысында теңдеулерді өлшемсіз түрге келтіріп алу өте ыңғайлы және өрнектерді ықшам түрде жазып, сараптама жасауға мүмкіндік береді. Біздің жағдайда массаның баланс және гидростатикалық тепе-теңдік теңдеуі өлшемсіз түрде төмендегідей жазылады:

$$\begin{cases} \frac{dm^*(x)}{dx} = 4\pi x^2 \rho^*(x) \\ \frac{dP^*(x)}{dx} = -\rho^*(x) \frac{m^*(x)}{x^2}, \end{cases} \quad (3)$$

Күй теңдеуі өлшемсіз түрде:

$$\begin{cases} \rho^*(x) = \frac{1}{3} \frac{m_n}{m_e} \frac{1}{\pi^2} \left(\frac{A}{Z}\right) y^3(x) \\ P^*(x) = \frac{1}{3} \frac{1}{8\pi^2} \left[ y(x) (2y^2(x) - 3) \sqrt{1 + y^2(x)} + 3 \ln(y(x) + \sqrt{1 + y^2(x)}) \right] \end{cases} \quad (4)$$

мұндағы,  $b$  – өлшем бірлігі ұзындыққа сәйкес келетін параметр,  $x$  – өлшем бірлігі жоқ радиал координат,  $m^*(x)$  – өлшемсіз масса,  $\rho^*(x)$  – өлшемсіз тығыздық,  $P^*(x)$  – өлшемсіз қысым. Өлшемсіз шамалардан қайта физикалық шама-

ларға өту үшін, төмендегі өрнектер қолданылады:

$$r = bx, \quad (5)$$

$$m(r) = \frac{c^2 b}{\gamma} m^*(x), \quad (6)$$

$$\rho(r) = \frac{c^2}{\gamma b^2} \rho^*(x), \quad (7)$$

$$P(r) = \frac{c^4}{\gamma b^2} P^*(x). \quad (8)$$

Толығырақ мәлімет алу үшін [11] әдебиетті қараңыз.

*Шекаралық шарттар*

Дифференциалдық теңдеулер жүйелерін шешу үшін шекаралық шарттар берілуі қажет. Бірінші шарт жұлдыздың ортасында беріледі, яғни  $x = 0$ -де тығыздықтың мәні  $\rho^*(0) = \rho_c$  таңдалып алынады. Орталық тығыздықтан (4) өрнек арқылы орталық өлшемсіз Ферми импульсін анықтап аламыз  $y^*(0) = y_c$ . Сонымен орталық тығыздық берілсе, Ферми импульсі арқылы орталық қысымды тауып аламыз. Екінші шарт массаның регулярлық шарты деп аталады және ол жұлдыздың ортасында мына түрде беріледі:  $m^*(0) = 0$  [5]. Үшінші шарт жұлдыздың бетінде  $P^*(x_s) = 0$  арқылы беріледі, мұндағы  $x = x_s$  жұлдыздың өлшемсіз толық радиусы.

Ал техникалық тұрғыдан дифференциалдық теңдеулерді сандық интегралдау  $x_i = 10^{-8}$  бастап  $x_f = 10^4$  дейін жүргізіледі және  $x_s$  осы аралықта жатады:  $x_i < x_s < x_f$ . Себебі, теңдеулерді  $x_i = 0$  бастап интегралдау анықталмағандыққа алып келеді, сондықтан интегралдау шегін неғұрлым нөлге жуық саннан бастаймыз  $x_i = 10^{-8}$ . Жұлдыздың  $x_i$  өлшемсіз радиусына сәйкес элементінің тығыздығы  $\rho^*(x_i) = 10^n \gamma b^2 / c^2$  деп алынады, мұндағы  $n = 3, 4, 5, \dots, 12$  аралығында өзгереді. Ал массаның регулярлық шарты  $x_i$  үшін енді төмендегідей жазылады

$$m^*(x_i) = \frac{4}{3} \pi x_i^3 \rho_c \quad (9)$$

Орталық қысым, жоғарыда көрсетілгендей (4) жүйедегі тығыздықтың өрнегінен  $\rho^*(x_i) = \rho_c$  және  $y(x_i) = y_c$  арқылы табылады.

Сандық интегралдаудың жоғарғы шегі  $x_f = 10^4$  деп беріледі. Теңдеулердің сандық шешімі

$x_i \leq x \leq x_s$  аралығында табылады, мұнда  $P^*(x_s) = 0$  шарты орындалғанда сандық интегралдау тоқтатылады, яғни  $x_s$  ылғи  $x_f$ -тен кіші болуы шарт. Осылайша (5) және (8) теңдеулерінің көмегімен өлшемсіз шамалардан өлшем бірлігі бар физикалық шамаларды қайта қалпына келтіріп аламыз.

*Ақ ергежейлі жұлдыздардың негізгі параметрлерін анықтауда шағын бағдарламалық кешен*

Бұған дейінгі жұмыста, ақ ергежейлі жұлдыздардың параметрлерін теориялық тұрғыда есептеуді көрсеткен болатынбыз [11]. Қажетті есептеулерді жүргізбес бұрын, есептеулерді қай бірліктер жүйесінде жүргізетінімізді белгілеп алу қажет. Біздің есептеулер СГС (сантиметр-грамм-секунд) бірліктер жүйесінде жүргізіледі. Ең алдымен қажетті тұрақты шамаларды енгіземіз:

```
In[1]:=  $\gamma = 6.67 \cdot 10^{-8}$  (*  $\frac{cm^3}{g \cdot s^2}$  *)
c =  $3 \cdot 10^{10}$  (*  $\frac{cm}{s}$  *)
me =  $9.10958215 \cdot 10^{-28}$  (*g*)
mn =  $1.6749 \cdot 10^{-24}$  (*g*)
A = 2 Z
Msun =  $2 \cdot 10^{33}$  (*g*)
h =  $1.054571628 \cdot 10^{-27}$  (*s (g*cm/s)2 *)

b :=  $\sqrt{\frac{h^3}{m_e^4 \cdot \gamma \cdot c}}$ 

Out[1]=  $6.67 \times 10^{-8}$ 
Out[2]= 30 000 000 000
Out[3]=  $9.10958 \times 10^{-28}$ 
Out[4]=  $1.6749 \times 10^{-24}$ 
Out[5]= 2 Z
Out[6]= 2 000 000 000 000 000 000 000 000 000 000 000
Out[7]=  $1.05457 \times 10^{-27}$ 
```

мұндағы:  $\gamma$  – гравитациялық тұрақты,  $c$  – жарық жылдамдығы,  $m_e$  – электронның массасы,  $m_n$  – нуклонның массасы,  $A$  – массалық сан,  $Z$  – протон саны,  $M_{sun}$  – Күн массасы,  $\hbar$  – келтірілген Планк тұрақтысы,  $b$  – өлшем бірлігі ұзындыққа сәйкес келетін параметр. Жақшаның ішінде екі жұлдызшаның ортасында өлшем бірлік комментарий ретінде көрсетілген.

Өлшемсіз күй теңдеулерін мына түрде енгіземіз [11]:

$$\text{In[9]:= } \rho[x_] = \frac{1}{3} * \frac{mn}{me} * \frac{1}{\pi^2} * \left(\frac{A}{Z}\right) * y[x]^3$$

$$P[x_] = \frac{1}{3} * \frac{1}{8 \pi^2} * \left( y[x] * (2 * y[x]^2 - 3) * \sqrt{1 + y[x]^2} + 3 * \text{Log} \left[ y[x] + \sqrt{1 + y[x]^2} \right] \right)$$

$$\text{Out[9]= } 124.194 y[x]^3$$

$$\text{Out[10]= } \frac{3 \text{Log} \left[ y[x] + \sqrt{1 + y[x]^2} \right] + y[x] \sqrt{1 + y[x]^2} (-3 + 2 y[x]^2)}{24 \pi^2}$$

Енді масса мен қысымның теңдеулері [5]:

$$\text{In[11]:= } \text{eqM}[x_] = M'[x] - 4 * \pi * x^2 * \rho[x]$$

$$\text{eqP}[x_] = P'[x] + \rho[x] * M[x] / x^2$$

$$\text{Out[11]= } -1560.66 x^2 y[x]^3 + M'[x]$$

$$\text{Out[12]= } \frac{124.194 M[x] y[x]^3}{x^2} +$$

$$\frac{4 y[x]^2 \sqrt{1 + y[x]^2} y'[x] + \frac{y[x]^2 (-3 + 2 y[x]^2) y'[x]}{\sqrt{1 + y[x]^2}} + \sqrt{1 + y[x]^2} (-3 + 2 y[x]^2) y'[x] + \frac{3 \left( y'[x] - \frac{y[x] y'[x]}{\sqrt{1 + y[x]^2}} \right)}{y[x] + \sqrt{1 + y[x]^2}}}{24 \pi^2}$$

Дифференциалдық теңдеулерді шешу үшін, шекаралық шарттар қажет, оларды төменгідей түрде енгіземіз [11]:

$$\text{In[14]:= } \text{xi} = 10^{-8}$$

$$\text{xf} = 10^4$$

$$\text{Out[14]= } \frac{1}{100000000}$$

$$\text{Out[15]= } 10000$$

Сандық шешімдерді NDSolve командасын қолдану арқылы аламыз [2].

Мұнда, қысым мен тығыздық арасында тек  $y_c = y(x_i)$  Ферми импульсі арқылы ғана байланыс бар:

$$\text{In[25]:= } \rho_c = 10^n * \gamma * b^2 / c^2$$

$$\text{Out[25]= } 0.0000630769 \times 10^n$$

$n$ -ге кез-келген 3-12 аралығындағы мәнді берсек болады. Мысалы үшін, орталық тығыздықты  $10^6 \text{ г/см}^3$  деп таңдап алайық. Сонда, өлшемсіз тығыздық пен Ферми импульсі төмендегідей анықталатын болады. Ал орталық қысым Ферми импульсі арқылы күй теңдеуінен есептелінеді.

$$\text{In[23]:= } \rho_c = 10^6 * \gamma * b^2 / c^2$$

$$\text{Out[23]= } 63.0769$$

$$\text{In[24]:= } y_c = (3 * me * \pi^2 * \rho_c / (2 * mn))^{1/3}$$

$$\text{Out[24]= } 0.797855$$

Осы тығыздыққа сәйкес келетін басқа параметрлерді анықтау үшін төмендегідей жазамыз:

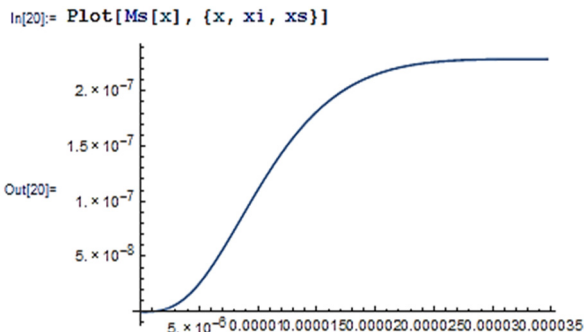
```

In[15]:= ρc = 106 * γ * b2 / c2
Mi = 4 * π / 3 * xi3 * ρc;
yc = (3 * me * π2 * ρc / (2 * mn))1/3;
sol = NDSolve[{eqM[x] == 0, eqP[x] == 0, M[xi] == Mi, y[xi] == yc}, {M, y}, {x, xi, xf}];
Ms[x_] = M[x] /. sol[[1]];
Ps[x_] = P[x] /. sol[[1]];
ρs[x_] = ρ[x] /. sol[[1]];
ys[x_] = y[x] /. sol[[1]];
xs = sol[[1, 1, 2, 1, 1, 2]];

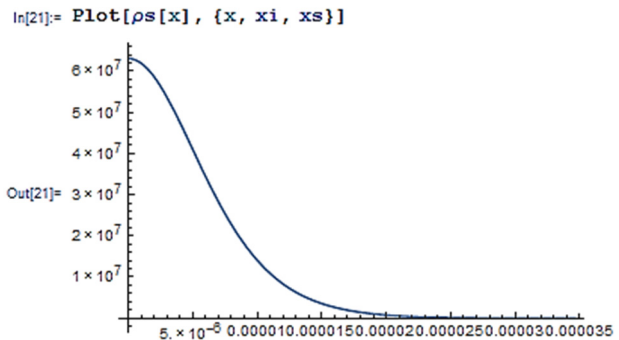
Out[15]= 63.0769
    
```

Мұнда, шекаралық шарттарды енгізгенде  $x_i = 0$  болу керек, бірақта бұл мән теңдеулерді интегралдауда анықталмағандыққа алып келеді. Сондықтан есептеулерімізде  $x_i = 10^{-8}$  деп таңдап алдық. Регулярлық шарт бойынша егер  $x_i = 0$  болса, сәйкесінше  $M(0) = 0$ .  $x_i$ -дің мәні 0-ден өзгеше болғандықтан,  $x_i = 10^{-8}$ -не сәйкес келетін массаның регулярлық шарты мына өрнек арқылы жазылады:  $M_i = 4\pi / 3 x_i^3 \rho c$ .

Анықталған өлшемсіз параметрлер бойынша графиктер тұрғызамыз (сурет-1, сурет-2, сурет-3, сурет-4). Бұл жұлдыздың физикалық қасиетін анықтауға мүмкіндік береді. 1-суретте, өлшемсіз массаның жұлдыз центрінен бастап, бетіне дейін қалай өзгеретіні көрсетілген. Масса жұлдыз бетіне қарай жақындаған сайын артады, ал бетінде максималды мәнге ие болады. 2-суретте, тығыздықтың жұлдыз центрінен бастап, бетіне дейін қалай өзгеретіні көрсетілген. Яғни, тығыздық жұлдыздың бетіне жақындаған сайын азаяды, ал дәл бетінде нөл болады.

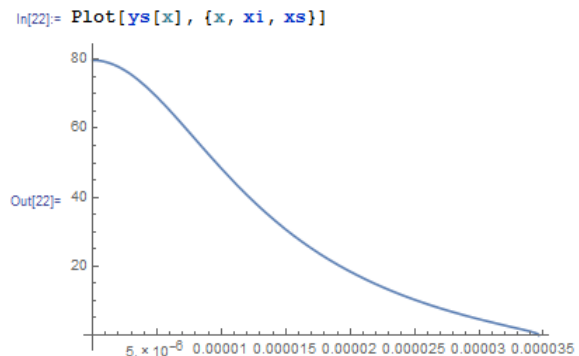


1-сурет – Өлшемсіз масса мен өлшемсіз радиус арақатынасы



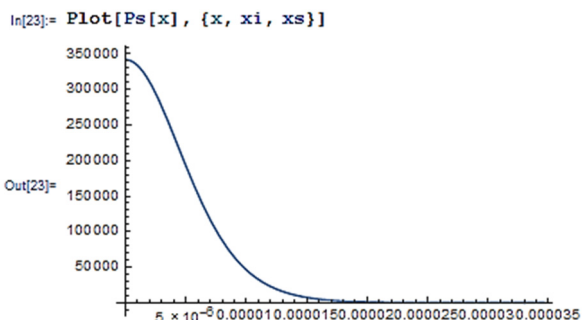
2-сурет – Өлшемсіз тығыздық пен өлшемсіз радиус арақатынасы

3-суретте, Ферми импульсінің жұлдыз центрінен бастап, бетіне дейін қалай өзгеретіні көрсетілген. АЕ жұлдыздың бетіне жақындаған сайын, Ферми импульсі кеми түседі.



3-сурет – Өлшемсіз Ферми импульсі мен өлшемсіз радиус арақатынасы.

4-суретте, қысымның жұлдыз центрінен бастап бетіне дейін қалай өзгеретіні көрсетілген. Яғни, қысым жұлдыздың ортасында максимум мән қабылдап, бетіне жақындаған сайын азайып, дәл бетінде нөл болады.



4-сурет – Өлшемсіз қысым мен өлшемсіз радиус арақатынасы.

Енді бізге орталық тығыздық  $10^6 \text{ г/см}^3$  болатын мәнге сәйкес келетін, толық радиус пен толық масса қажет. Ол үшін, бұл шамаларды жұлдыздың бетінде есептеп аламыз және олардың өлшем бірліктерін қалпына келтіреміз.

```
In[32]:= R = b * xs * 10^-5, Ms[xs] / Msun b c^2 / \gamma
```

```
In[32]:= R = b * xs * 10^-5
```

```
Out[32]= 10 885.2
```

```
In[30]:= Table[{ \rho c = 10^n * \gamma * b^c / c^c;
  Mi = 4 * \pi / 3 * xi^3 * \rho c;
  \gamma c = (3 * m e * \pi^2 * \rho c / (2 * m n))^{1/3};
  sol = NDSolve[{eqM[x] = 0, eqP[x] = 0, M[xi] = Mi, y[xi] = \gamma c}, {M, y}, {x, xi, xf}];
  Ms[x_] = M[x] /. sol[[1]];
  Ps[x_] = P[x] /. sol[[1]];
  \rho s[x_] = \rho[x] /. sol[[1]];
  ys[x_] = y[x] /. sol[[1]];
  xs = sol[[1, 1, 2, 1, 1, 2]];
  10^n, R = b * xs * 10^-5, Ms[xs] / Msun b c^2 / \gamma
}, {n, 3, 12}]
```

```
Out[31]= {{1000, 35216.4, 0.0152354}, {10000, 23968.2, 0.0477419}, {100000, 16258.1, 0.144903},
{1000000, 10885.2, 0.390837}, {10000000, 7039.25, 0.796174}, {100000000, 4300.93, 1.15465}, {1000000000, 2455.68, 1.33826},
{10000000000, 1309.15, 1.40277}, {100000000000, 659.255, 1.42053}, {1000000000000, 319.53, 1.42477}}
```

Шыққан мәндерге атты меншіктеп береміз:

```
In[17]:= WD = {{1000, 35216.3987441911, 0.015235376102718646}, {10000, 23968.20015245043, 0.047741890750817334},
{100000, 16258.078672800133, 0.14490331980291135}, {1000000, 10885.234819430023, 0.3908373582421445},
{10000000, 7039.254266168939, 0.7961736339830594}, {100000000, 4300.930870835025, 1.1546528991291936},
{1000000000, 2455.678467213655, 1.3382592206133332}, {10000000000, 1309.1455814488438, 1.402772194109911},
{100000000000, 659.2547463815067, 1.420525701906374}, {1000000000000, 319.53038640434005, 1.424770566700354}}
Out[17]= {{1000, 35216.4, 0.0152354}, {10000, 23968.2, 0.0477419}, {100000, 16258.1, 0.144903},
{1000000, 10885.2, 0.390837}, {10000000, 7039.25, 0.796174}, {100000000, 4300.93, 1.15465}, {1000000000, 2455.68, 1.33826},
{10000000000, 1309.15, 1.40277}, {100000000000, 659.255, 1.42053}, {1000000000000, 319.53, 1.42477}}
```

```
In[33]:= Ms[xs] / Msun b c^2 / \gamma
```

```
Out[33]= 0.390837
```

Біз жоғарыда есептеулер жүргізбес бұрын, есептеулерді СГС бірліктер жүйесінде жүргіземіз деп келісіп алған болатынбыз. Сондықтан да, жоғарыда көріп отырғанымыздай, радиусқа  $10^{-5}$  – сін көбейтіп жазу арқылы, см-ді км-ге айналдырдық. Дәл осылай, массаға қатысты өлшем бірлікті СГС бірліктер жүйесінде жазу үшін, массаны  $b c^2 / \gamma$  – ға көбейтіп, сәйкесінше массаны грамм арқылы жазып алдық. Осы шаманы Күннің массасына бөлу арқылы нормалаймыз.

Мұндағы:  $R$  – жұлдыздың толық радиусы,  $x_s$  – әртүрлі тығыздыққа сәйкес келетін жұлдыздың өлшемсіз толық радиусы,  $M_s$  – өлшем бірліксіз масса,  $M_{sun} = (1,98892 \pm 0,00025) \cdot 10^{30}$  кг – Күн массасы. Толық масса мен толық радиусты анықтау үшін, тығыздықтың мәнін өзіміз қолдан береміз, яғни  $n = 3,4 \dots 12$ . Сондықтан, жоғарыдағы есептеулерді қайта Table командасы арқылы жүргіземіз [2, 3]:

Мәндерді кесте ретінде жазу үшін, TableForm командасына жүгінеміз:

```
In[18]:= WD // TableForm
Out[18]/TableForm=

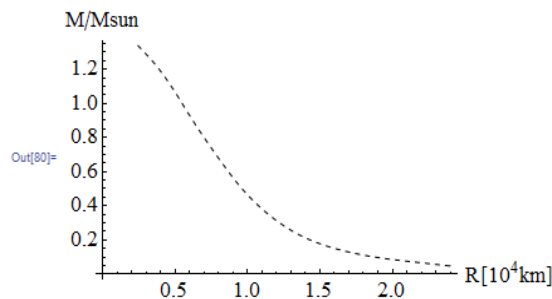

| $\rho$ central | Rinkm   | M/Msun    |
|----------------|---------|-----------|
| 1000           | 35216.4 | 0.0152354 |
| 10000          | 23968.2 | 0.0477419 |
| 100000         | 16258.1 | 0.144903  |
| 1000000        | 10885.2 | 0.390837  |
| 10000000       | 7039.25 | 0.796174  |
| 100000000      | 4300.93 | 1.15465   |
| 1000000000     | 2455.68 | 1.33826   |
| 10000000000    | 1309.15 | 1.40277   |
| 100000000000   | 659.255 | 1.42053   |
| 1000000000000  | 319.53  | 1.42477   |


```

мұнда,  $\rho_{\text{central}}$  -  $\text{г/см}^3$ -та жазылған орталық тығыздық,  $R_{\text{inkm}}$  - км-де жазылған жұлдыздың толық радиусы,  $M/M_{\text{sun}}$  - күнің массасына нормаланған жұлдыздың толық массасы. Жоғарыда анықталған параметрлер арқылы, M-

R (масса-радиус), M-р (масса-тығыздық) және R-р (радиус-тығыздық) қатынастарын тұрғыздық (сурет-5, сурет-6, сурет-7). Осы суреттерде ақ ергежейлі жұлдыздардың негізгі қасиеттері сипатталған.

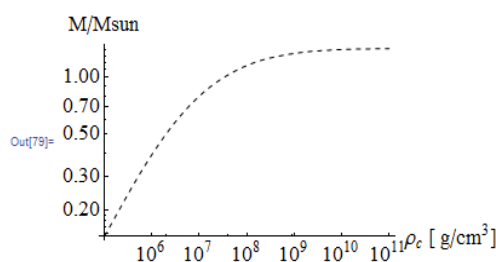
```
In[80]:= GraphWD = ListPlot[Table[{WD[[i, 2]]/10^4, WD[[i, 3]]}, {i, 2, 7}], Joined -> True, InterpolationOrder -> 2,
PlotStyle -> {{Black, Dashed, Thin}, {Black, Dashed, Thin}, {Thin}, {Thin}}, AxesLabel -> {"R[10^4km]", "M/Msun"},
BaseStyle -> {FontFamily -> "Times", FontSize -> 17}]
```



**5-сурет** – Классикалық физикадағы ақ ергежейлі жұлдыздардың M-R (масса-радиус) қатынасы. Бұл қатынас, AE жұлдыздарда масса артқан сайын, радиустың кеми түсетінін көрсетеді

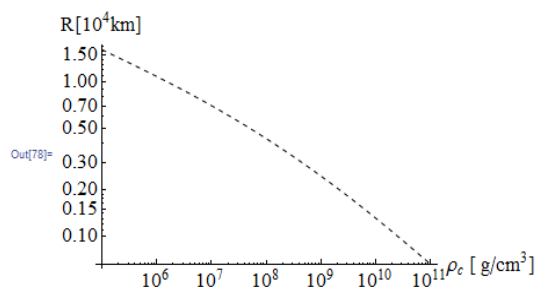
```
In[79]:= GraphWD = ListLogLogPlot[Table[{WD[[i, 1]], WD[[i, 3]]}, {i, 3, 9}], Joined -> True, InterpolationOrder -> 2,
PlotStyle -> {{Black, Dashed, Thin}, {Black, Dashed, Thin}, {Thin}, {Thin}},
AxesLabel -> {" $\rho_c$  [ g/cm^3]", "M/Msun"}, BaseStyle -> {FontFamily -> "Times", FontSize -> 17}]
```





**6-сурет** – Классикалық физикадағы ақ ергежейлі жұлдыздардың М-р (масса-тығыздық) қатынасы. М-р (масса-тығыздық) қатынасы, АЕ жұлдыздарда масса артқан сайын сәйкесінше тығыздықтың да артатынын көрсетеді

```
In[78]:= GraphWD = ListLogLogPlot[Table[{WD[[i, 1]], WD[[i, 2]]/10^4}, {i, 3, 9}], Joined -> True, InterpolationOrder -> 2,
PlotStyle -> {{Black, Dashed, Thin}, {Black, Dashed, Thin}, {Thin}, {Thin}},
AxesLabel -> {"rho_c [ g/cm^3 ]", "R[10^4 km]"}, BaseStyle -> {FontFamily -> "Times", FontSize -> 17}]
```



**7-сурет** – Классикалық физикадағы ақ ергежейлі жұлдыздардың R-р (радиус-тығыздық) қатынасы. Бұл қатынас, АЕ жұлдыздарда тығыздық артқан сайын радиустың кемітінін көрсетеді

Wolfram Mathematica бағдарламасындағы командалар жайлы толық мәліметті [1, 2, 3] әдебиеттерден қараңыз.

### Қорытынды

Жұмыста Wolfram Mathematica бағдарламасының көмегімен, ақ ергежейлі жұлдыздардың негізгі параметрлерін анықтау әдістемесі көрсетілді. Осы мақсатта, Ньютондық гидростатикалық тепе-теңдік теңдеуі, массаның баланс және айныған электрондық газдың күй теңдеулерінен құралған жүйе шешілді. Барлық теңдеулер, есептеулерді жеңілдету үшін, өлшемсіз түрге келтіріліп алынды. Теңдеулер аналитикалық тұрғыда шешілмейтін болғандықтан, алдын ала анықталған шекаралық шарттармен сандық түрде шешілді. Сандық шешімдер арқылы, ақ ергежейлі жұлдыздардың параметрлері есептелінді және масса-орталық ты-

ғыздық, масса-радиус, радиус-орталық тығыздық қатынастары алынды.

Барлық есептеулер Mathematica бағдарламасында қалай жүргізілу керектігі айқын, рет-ретімен көрсетілді. Шағын бағдарламалық кешен арқылы әуелі тұрақтылар енгізілді. Сосын құрылым теңдеулері мен күй теңдеулері жазылды. Одан кейін, шекаралық шарттар енгізілді. Мысал ретінде орталық тығыздықтың белгілі бір мәні таңдап алынып, соған сәйкес келетін Ферми импульсі есептелінді. Одан әрі, құрылым теңдеулері сандық түрде шешілді. Келесі кадамда, орталық тығыздықтың мәні белгілі бір аралықта өзгеретіндей етіп таңдалып алынып, осы аралыққа сәйкес келетін толық радиус пен масса есептелді. Ақырында, алынған сандық шешімдер арқылы қажетті қатынастар тұрғызылды. Алынған нәтижелер басқа әдебиеттерде көрсетілген нәтижелерге сәйкес келеді [5, 6, 7].

Бұл жұмыс, жоғарғы оқу орындарындағы техникалық мамандықтар, соның ішінде физика және астрономия мамандықтарының студенттеріне, жалпы физика курсы, теориялық физика курстары, астрономия және астрофизика пәндері бойынша дәріс, семинар немесе лабораториялық сабақтарда аналитикалық шешімі жоқ есептерді сандық түрде шешуде, таптырмас үлгі болып табылады. Сонымен қатар, жұмыстың жоғарыда айтылған пәндер бойынша әсіресе

семинар және лабораториялық сабақтарында теориялық білімді бекітуде атқаратын рөлі орасан зор. Оқытушылар мен жас ғалым мамандарға әдістемелік құрал ретінде ұсынылады.

*Жұмыс ҚР БҒМ-нің ИПС-11 грантының қолдауымен орындалды. Сонымен бірге, Қ.А. Бошқаев ҚР БҒМ-нің «2015-2016 жылғы үздік жас ғалым» шәкіртақысынан, «2015 жылғы ЖОО-ның үздік оқытушысы» грантынан қолдау алды.*

### Әдебиеттер

- 1 www.wolfram.com
- 2 Sadri Hassani. *Mathematical Methods Using Mathematica: For Students of Physics and Related Fields*. Springer, 2003. – 253 p.
- 3 Robert L. Zimmerman, Fredrick I. Olness. *Mathematica for physics*. Addison-Wesley. Second edition. – 2002. –645 p.
- 4 Kepler S.O., Pelisoli I., Koester D., Ourique G., Kleinman S.J., Romero A.D., Nitta A., Eisenstein D.J., Costa J.E.S., Kulebi B., Jordan S. *New white dwarf stars in the Sloan Digital Sky Survey Data Release 10 // MNRAS*. – 2015. – Vol.446. – P.4078-4087.
- 5 Shapiro S.L., Teukolsky S.A. *Black holes, White dwarfs and Neutron stars // Cornell University, Ithaca, New York*. – 1985. – P.69-86.
- 6 Chandrasekhar S. *The Maximum Mass of Ideal White Dwarfs // The Astrophysical Journal*. – 1931. – Vol.74 (1). – P.115-116.
- 7 Kepler S.O., Pelisoli I., Koester D., Ourique G., Romero A.D., Reindl N., Kleinman S.J., Eisenstein D.J. *New white dwarf and subdwarf stars in the Sloan Digital Sky Survey Data Release 12 // MNRAS*. – 2016. – Vol.455. – P.1-11.
- 8 Kepler S.O., Koester D., Ourique G. *A white dwarf with anoxygen atmosphere // Science*. – 2016. -Vol. 352(6281). – P. 67-70.
- 9 Kepler O., Kleinman S.J., Nitta A., Koester D., Castanheira B.G., Giovannini O., A.F.M., Costa, L. Althaus. *White dwarf mass distribution in the SDSS // Mon. Not. R. Astron*. – 2007. – Vol.375. – P.1315-1324.
- 10 Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Статическая физика. Часть 1*. – М.: Физматлит, 2010, – 616 с.
- 11 Бошқаев Қ.А., Жәми Б.А., Қалымова Ж.А., Балгимбеков Г.Ш., Таукенова А.С., Бришева Ж.Н. және Қойшыбаев Н. *Ақ ергежейлі жұлдыздардың негізгі параметрлерін теориялық тұрғыдан анықтау // Известия НАН РК*. – 2016.

### References

- 1 www.wolfram.com
- 2 Sadri Hassani. *Mathematical Methods Using Mathematica: For Students of Physics and Related Fields*. Springer, 2003, 253 p.
- 3 Robert L. Zimmerman, Fredrick I. Olness. *Mathematica for physics*. Addison-Wesley. Second edition, 2002, 645 p.
- 4 S.O. Kepler, I. Pelisoli, D. Koester, G. Ourique, S.J. Kleinman, A.D. Romero, A. Nitta, D.J. Eisenstein, J.E.S. Costa, B. Kulebi, S. Jordan, *MNRAS*, 446, 4078-4087, (2015).
- 5 S.L. Shapiro, S.A. Teukolsky. *Black holes, White dwarfs and Neutron stars // Cornell University, Ithaca, New York*, 1985, p.69-86.
- 6 S. Chandrasekhar, *The Astrophysical Journal*, 74 (1), 115-116, (1931).
- 7 S.O. Kepler, I. Pelisoli, D. Koester, G. Ourique, A.D. Romero, N. Reindl, S.J. Kleinman, D.J. Eisenstein, *MNRAS*, 455, (1-11), (2016).
- 8 S.O. Kepler, D. Koester, G. Ourique, *Science*, 352(6281), 67-70, (2016).
- 9 O. Kepler, S.J. Kleinman, A. Nitta, D. Koester, B.G. Castanheira, O. Giovannini, A.F.M., Costa, L. Althaus, *Mon. Not. R. Astron*, 375, 1315-1324, (2007).
- 10 L.D. Landau, Ye.M. Lifshits, *Statischeckaya fizika. Chast' 1*. M.: Fizmatlit, 2010, 616 s. (in russ).
- 11 K.A. Boshkayev, B.A. Zhәmi, Zh.A. Kalymova, G.Sh. Balgimbekov, A.S. Taukenova, Zh.N. Brisheva zhәne N.Koyshybayev. *Ak yergezheyli zhuldyzdarдың neгіzgi parametrlerini teoriyalyk, tırғыdan anyk,tau // Izvestiya NAN RK*, 2016. (in kaz).



Аймағанбетов К.П.,  
Жолдыбаев К.С.,  
Жантуаров С.Р.,  
Рахимбаев Б.С.,  
Токмолдин Н.С.

**Реализация метода  
нестационарной  
спектроскопии глубоких  
уровней в условиях  
лабораторного эксперимента  
для студентов вузов**

В статье описывается метод нестационарной спектроскопии глубоких уровней (DLTS) применительно к лабораторному эксперименту студентов, проходящих обучение по специализации в области полупроводниковых материалов и приборов в высших учебных заведениях. Данная методика применяется для исследования глубоких примесных уровней в барьерных структурах или p-n переходах. Основное преимущество данного метода заключается в его высокой чувствительности. Другими преимуществами метода являются возможность изучения процессов захвата и эмиссии носителей заряда на глубоких уровнях, исследование поведения дефектов и их природы, возможность определения параметров глубоких уровней, таких как энергия активации, сечение захвата и их концентрация, возможность определения типа ловушек. В качестве демонстрации данной методики представлены результаты измерений стандартным методом DLTS на кремниевых и германиевых диодах, полученные при помощи спектрометра DLS. На основании приведенного в статье материала возможна разработка методического пособия для лабораторных работ. Применение данной методики в обучающих условиях лабораторного эксперимента в вузах позволит студентам развить широкий спектр теоретических знаний и экспериментальных навыков в области полупроводниковой физики.

**Ключевые слова:** нестационарная спектроскопия глубоких уровней, примесь, релаксация, захват, эмиссия.

Aimaganbetov K.P.,  
Zholdybayev K.S.,  
Zhantuarov S.R.,  
Rakhimbayev B.S.,  
Tokmoldin N.S.

**Implementation of the method of  
deep level transient spectroscopy  
as a laboratory experiment for  
higher education students**

The manuscript describes the method of deep level transient spectroscopy (DLTS) as applied to the laboratory experiment for students specializing in the fields of semiconductor materials and devices at higher education institutions. The technique is employed to study deep impurity levels in barrier structures or p-n junctions. The main advantage of this method is its high sensitivity. Other advantages include the abilities to study the processes of capture and emission of charge carriers from deep level traps, to investigate the behavior of defects and their nature, to determine the parameters of deep levels such as activation energy, capture cross section and concentration, as well as to determine the type of charge carrier traps. As part of the demonstration of this technique results of the standard DLTS measurements using silicon and germanium diodes obtained using a DLS spectrometer are presented. Based on the material presented in the manuscript development of laboratory teaching aids is possible. The use of this technique as part of the laboratory experiment at higher education institutions will enable the students to develop a wide range of theoretical and experimental skills in the field of semiconductor physics.

**Key words:** deep level transient spectroscopy, impurity, relaxation, capture, emission.

Аймағанбетов К.П.,  
Жолдыбаев Қ.С.,  
Жантуаров С.Р.,  
Рахимбаев Б.С.,  
Токмолдин Н.С.

**ЖОО-ғы студенттер үшін  
зертханалық тәжірибелер  
жасау шарты ретінде терең  
деңгейлі стационарлы емес  
спектроскопия әдісін жүргізу**

Мақалада ЖОО-дағы жартылай өткізгішті материалдар мен құрылғылар саласы бойынша мамандандырылған студенттер үшін, терең деңгейлі стационарлы емес спектроскопия (DLTS) әдісін зертханалық тәжірибе ретінде қолданылуы жайлы жазылады. Осы әдісте тосқауылды құрылымды немесе p-n өткелдегі қоспалы және терең деңгейлерді зерттеу үшін қолданылады. Бұл әдістеменің артықшылығы, оның жоғары сезімталдығы болып табылады. Сонымен қатар басқа да артықшылықтарының бірі, терең деңгейлердегі заряд тасымалдаушыларды ұстап қалу және эмиссиялау процесстерін оқып үйренуге және дефекттердің сипаттамаларымен оның табиғатын зерттеуге, терең деңгейдің параметрлерін (терең деңгейлі энергия, ұстап қалу қимасы және концентрациясы) анықтауға мүмкіндік береді. Әдістемені жүргізу кезінде кремнилі және германилі диодтарға DLS спектрометр көмегімен алынған стандартты DLTS әдісінің зерттеу нәтижелері көрсетілген. Мақалада көрсетілген негізгі ақпараттармен және зерттеу нәтижелері, зертханалық жұмыстар үшін кешенді әдістемелер жасауға мүмкіндік береді. Бұл әдістемені ЖОО-да тәжірибелік жұмыстар жүргізу ретінде қолдану, студенттердің жартылай өткізгішті физика саласы бойынша теориялық және тәжірибелік дағдыларының артуына зор үлесін қосады.

**Түйін сөздер:** терең деңгейлі стационарлы емес спектроскопия, қоспа, релаксация, ұстап қалу, эмиссия.

**РЕАЛИЗАЦИЯ МЕТОДА  
НЕСТАЦИОНАРНОЙ  
СПЕКТРОСКОПИИ  
ГЛУБОКИХ УРОВНЕЙ  
В УСЛОВИЯХ  
ЛАБОРАТОРНОГО  
ЭКСПЕРИМЕНТА  
ДЛЯ СТУДЕНТОВ  
ВУЗОВ**

**Введение**

Наличие локализованных состояний в полупроводниковых материалах оказывает значительное воздействие на их электрические характеристики, такие как время жизни носителей, проводимость и т.д. Такие состояния, находящиеся в запрещенной зоне, называются «глубокими уровнями». Соответствующие этим состояниям дефекты могут быть как собственными, так и возникать под влиянием различных технологических факторов в процессе получения материала. В настоящее время для определения таких параметров глубоких уровней, как энергия активации и концентрация, широко используется метод нестационарной спектроскопии глубоких уровней НСГУ (в переводе с англ. «deep level transient spectroscopy (DLTS)»). Основное преимущество данного метода заключается в его высокой чувствительности. Кроме того, он позволяет полностью исследовать структуру запрещенной зоны полупроводника за один цикл температурного сканирования. Как правило, эта методика применяется для исследования глубоких примесных уровней в барьерных структурах или p-n переходах. В последние годы метод получил свое развитие в применении к исследованию полупроводниковых наноструктур.

Метод НСГУ впервые был предложен Д.В. Лэнгом в 1974 году. Он основан на измерении релаксации емкости полупроводниковой барьерной структуры вследствие изменения ширины области пространственного заряда, под действием импульсного изменения напряжения смещения [1].

Преимуществами данного метода являются:

- возможность изучения процессов захвата и эмиссии носителей заряда на глубоких уровнях, исследование поведения дефектов и их природы;
- возможность определения параметров глубоких уровней, таких как энергия активации, сечение захвата и их концентрация;
- возможность определения типа ловушек.

Целью данной работы является разработка подхода к внедрению данной методики в учебный курс студентов высших учебных заведений, обучающихся по специальностям, свя-

занным с изучением полупроводниковых материалов и структур. Изучение данной методики позволит обучающимся получить более полное представление о структуре энергетических зон в полупроводниковых материалах, а также о процессах захвата и эмиссии носителей заряда в запрещенной зоне полупроводников. Внедрение данной методики в курс лабораторных занятий может основываться на первоначальном изучении обучающимися теоретического материала, связанного с природой глубоких уровней в полупроводниковых барьерных структурах, и дальнейшем проведении лабораторного эксперимента.

### Экспериментальная часть

#### Предварительные измерения

В качестве лабораторных образцов предлагаемого лабораторного эксперимента для студентов могут использоваться промышленные диоды. В данном случае, в качестве тестовых образцов выбраны выпрямительные диоды Д223А (кремниевый диод) и Д18 (германиевый диод). В таблице 1 приведены основные характеристики исследуемых диодов.

**Таблица 1** – Основные характеристики исследуемых диодов

Наименование диода	$U_{обр(max)}$ , В	$I_{max}$ , А	$C_{общая}$ , пФ
Д223А	200/230	2/50	0,75
Д18	20	1,6	0,5

#### Проведение измерений методом НСГУ

Измерения методом НСГУ проводят на DLS-спектрометре. Принципиальная блок-схема установки для проведения эксперимента приведена на Рисунке 1. Установка состоит из следующих компонентов:

##### 1. Емкостный DLS-спектрометр:

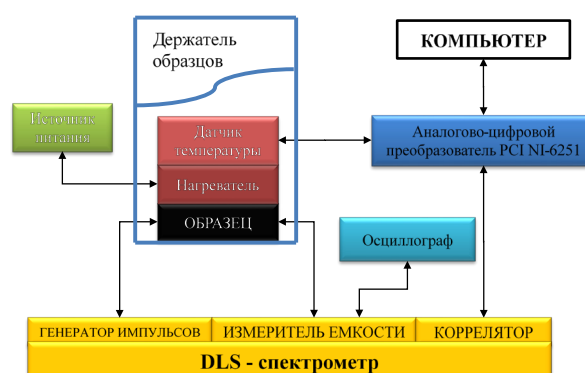
- диапазон измеряемых емкостей (1 ÷ 1000) пФ;
- временное окно измерения – 0,02 ÷ 100 мс при рабочей частоте 1 МГц;
- относительная погрешность измерения ёмкости – не более 2%;
- диапазон напряжений смещения (–10 ÷ 10) В.

##### 2. Аналого-цифровой преобразователь (АЦП) PCI NI-6251 (National Instruments) для

измерения релаксации емкости  $C(t)$ , подключенные к соединительному блоку SCB-68 (National Instruments) с датчиком температуры. При помощи платы PCI NI-6251 сигнал НСГУ записывается в память компьютера.

3. Держатель образцов, обеспечивающий проведение эксперимента при температурах от 77 до 350 К.

4. Осциллограф DS-1150 для наблюдения временных параметров электрических сигналов.



**Рисунок 1** – Принципиальная блок-схема измерительной установки

### Получение, обработка и анализ данных

Детальное описание метода представлено в работе [2]. Как правило, методика применяется для исследования глубоких (примесных) уровней в барьерных структурах или  $p-n$  переходах. Ширина области пространственного заряда, образующегося в  $p-n$  переходах между  $p$ - и  $n$ -областями определяется соотношением [2, 3]:

$$W = \sqrt{\frac{2\epsilon\epsilon_0(V_k + V)}{e} \left( \frac{1}{N_A} + \frac{1}{N_D} \right)}, \quad (1)$$

где  $V_k$  – встроенный потенциал на переходе,  $V$  – приложенное извне напряжение смещения,  $N_D$  и  $N_A$  – концентрации ионизированных доноров и акцепторов в области пространственного заряда,  $\epsilon$  – диэлектрическая проницаемость,  $e$  – элементарный заряд.

Благодаря выравниванию уровней Ферми  $p$ - и  $n$ -областях и перетеканию свободных носителей из одной области в другую, в  $n$ -части области пространственного заряда образуется положительный заряд ионизированных доноров, а в  $p$ -части отрицательный заряд ионизированных акцепторов. При этом свободные носители (элек-

троны и дырки) в области пространственного заряда отсутствуют. При приложении к р-п переходу обратного напряжения, внешнее поле складывается с внутренним электрическим полем и приводит к расширению области пространственного заряда. При этом происходит изменение емкости р-п перехода. Емкость области пространственного заряда можно оценить, рассматривая р-п переход как плоский конденсатор, расстояние между пластинами в котором равно ширине области пространственного заряда [2, 3].

$$C = (\epsilon \epsilon_0 S) / W, \quad (2)$$

где  $\epsilon$  – диэлектрическая проницаемость,  $\epsilon_0$  – диэлектрическая постоянная,  $S$  – площадь перехода.

Измерения методом НСГУ проводят следующим образом: исследуемый образец укрепляется на держателе, внешний корпус держателя помещается в сосуд Дьюара с жидким азотом, и таким образом исследуемый образец охлаждается до температуры 77 К.

В держатель образцов вмонтирован резистивный нагреватель. По мере выкипания жидкого

азота при включённом нагревателе температура образца плавно меняется с течением времени от 77 до 300-350 К. Согласно ранним экспериментальным наблюдениям, желаемая скорость изменения температуры образца должна находиться в диапазоне 0,01÷0,5 К/сек [4, 5]. Температура образца контролируется при помощи термодпары, встроенной в держатель образцов.

Генератор импульсов позволяет управлять приложенным к образцу напряжением. При его включении выставляется стационарное состояние обратного напряжения ( $V = -1$  В). В ходе измерения на исследуемый образец подаются кратковременные импульсы напряжения, которые приводят к изменению ширины области пространственного заряда на р-п переходе. При этом температура образца медленно изменяется от 77 К до 350 К. В рекомендуемом варианте проведения измерений при приложении кратковременных импульсов напряжение на обкладках образца изменяется в диапазоне от 1 В до 0,1 В, как это показано на Рисунке 2. Ранние работы показали, что ширина (длительность) импульса, равная 1 мс, достаточна для полного заполнения исследуемых глубоких уровней [5].

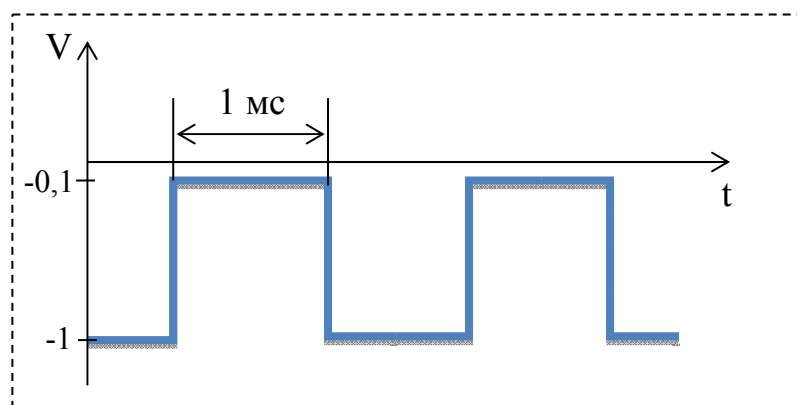


Рисунок 2 – Переключение напряжение смещения

Когда устанавливается первоначальное обратное напряжение смещения «-1В», после чего ширина области пространственного заряда начинает восстанавливается до ее первоначального значения. Свободные носители (электроны или дырки) беспрепятственно выносятся электрическим полем из области пространственного заряда. Захваченные же глубокими уровнями носители покидают область пространственного

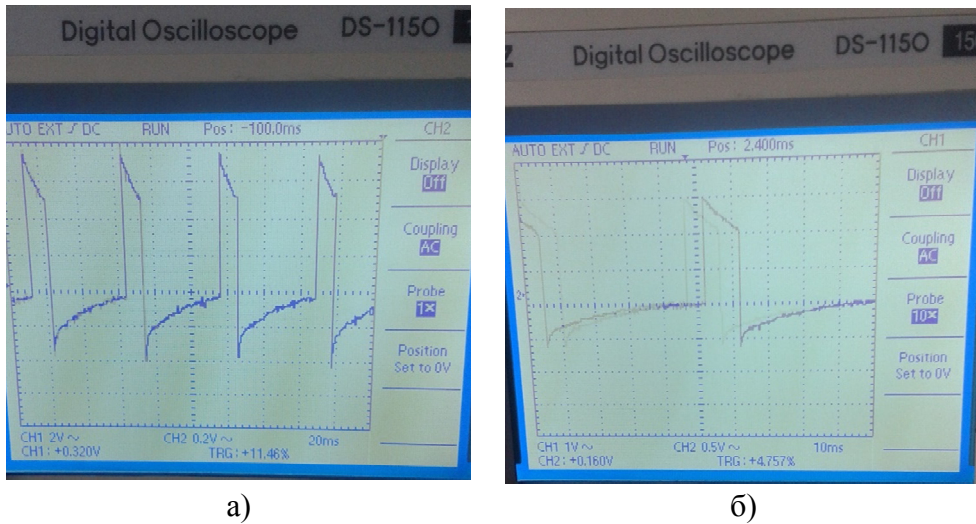
заряда более медленно. Этот процесс называется «эмиссией» захваченных носителей в зону проводимости. Скорость эмиссии носителей заряда из глубокого уровня в зону проводимости экспоненциально зависит от температуры образца и энергии ионизации ЕГУ. Восстановление барьерной ёмкости при эмиссии захваченных глубокими уровнями носителей называют «релаксацией» ёмкости.

В случае электронной ловушки при концентрации глубоких уровней не превышающей концентрацию свободных носителей ( $NGU < n$ ) наблюдается экспоненциальная релаксация емкости:

$$C(t) = \Delta C \exp(-t/\tau), \quad (3)$$

где  $NGU$  – концентрация глубоких уровней;  $n$  – концентрация свободных носителей заряда;  $\Delta C$  – изменение емкости при импульсе,  $\tau$  – постоянная времени релаксации.

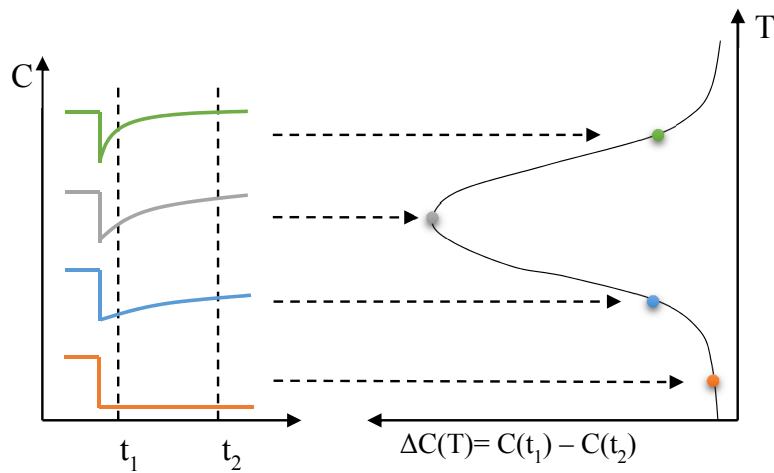
При подключении к измерителю DLS-спектрометра осциллографа на нем можно наблюдать вид релаксаций емкости в ходе эксперимента (см. Рисунок 3).



**Рисунок 3** – Изображения релаксации емкости диодов, наблюдаемые на осциллографе: а) для кремниевого КД223А диода, б) для германиевого Д18 диода

Важнейшим шагом при определении параметров глубоких уровней является построение спектра НСГУ. Спектр НСГУ строится на основе кривых релаксации ёмкости и представляет собой зависи-

мость изменения емкости в определенном временном интервале  $[t_1, t_2]$  от температуры образца. На Рисунке 4 показан вид спектра НСГУ применительно к захвату глубокими уровнями носителей.



**Рисунок 4** – Получение спектра НСГУ во временном интервале  $(t_2 - t_1)$  из кривых релаксации емкости для различных температур

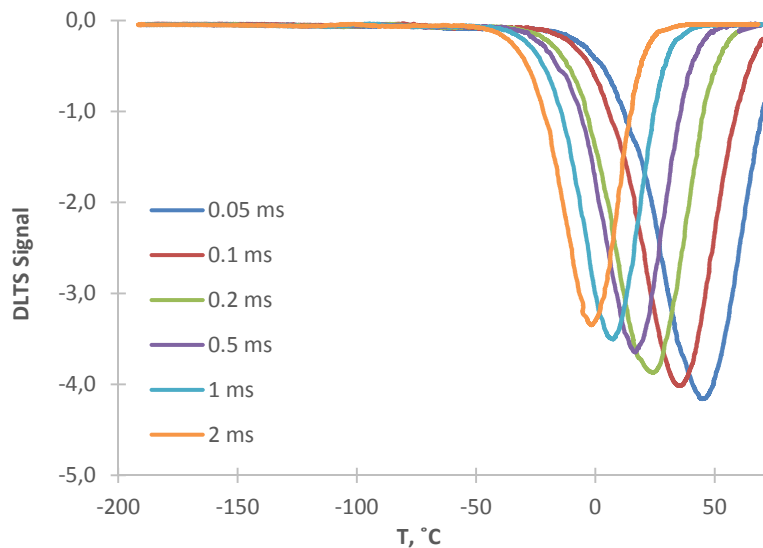


Диапазон измерения релаксации емкости (временное окно измерения) задается и изменяется вручную. Каждая отдельная процедура измерения при изменении температуры в заданном диапазоне (температурное сканирование) проводится при определенном временном окне. В рамках работы рекомендуется проведение нескольких (5-6) температурных сканирований при разных временных окнах. Как указывалось, это позволяет получить информацию о величине энергии активации, концентрации и сечении захвата глубоких уровней.

Релаксация емкости образца регистрируется в измерителе DLS-спектрометра и далее обрабатывается в корреляторе, функционирующем как двух-

стробный интегратор сигналов (двойной Voxcar). Это позволяет усреднить сигнал для улучшения соотношения сигнал-шум и обнаружить глубокие уровни с низкой концентрацией [6]. С выхода коррелятора сигнал НСГУ поступает через соединительный блок SCB-68 на вход преобразователя PCI-NI-6251 и далее в персональный компьютер. Полученные экспериментальные данные обрабатываются при помощи интерфейса LabVIEW с получением спектров НСГУ. Сигнал датчика температуры также поступает на вход преобразователя и регистрируется в программном интерфейсе.

На Рисунках 5 и 6 приведены спектры НСГУ для исследуемых кремниевого и германиевого диодов при различных временных окнах.



**Рисунок 5** – Спектры НСГУ для кремниевого диода D223A при различных временных окнах

Каждый из наблюдаемых на спектрах пиков соответствует отдельному глубокому уровню. Далее, для каждого отдельного спектра на основании значения температуры в точке экстремума и значения временного окна, определяется точка на графике Аррениуса (см. Рисунки 7 и 8).

Для определения энергии активации глубокого уровня  $\Delta E_{ГУ}$  и сечения захвата глубокого уровня  $\sigma$  используется зависимость, именуемая формулой Ричардсона для термионной эмиссии [5]:

$$e_{n,p}(T) = \frac{1}{\tau} = AT^2 \exp\left[-\frac{\Delta E_{ГУ}}{kT}\right] \quad (4)$$

при

$$A = \frac{4\sqrt{6}\sigma k^2 \pi^{3/2} m^*}{h^3} \quad (5)$$

где  $e_{n,p}$  – скорость эмиссии рассматриваемых носителей,  $\Delta E_{ГУ}$  – энергия активация глубокого уровня,  $k$  – постоянная Больцмана,  $\sigma$  – сечение захвата носителей,  $m^*$  – средняя тепловая скорость носителей.

Преобразовав вид выражения (5) получим [1, 2, 8]:

$$\ln\left(\frac{1}{\tau T^2}\right) = \ln(K\sigma) - \frac{\Delta E_{ГУ}}{kT}, \quad (6)$$

где

$$K = \frac{4\sqrt{6}k^2 \pi^{3/2} m^*}{h^3} \quad (7)$$

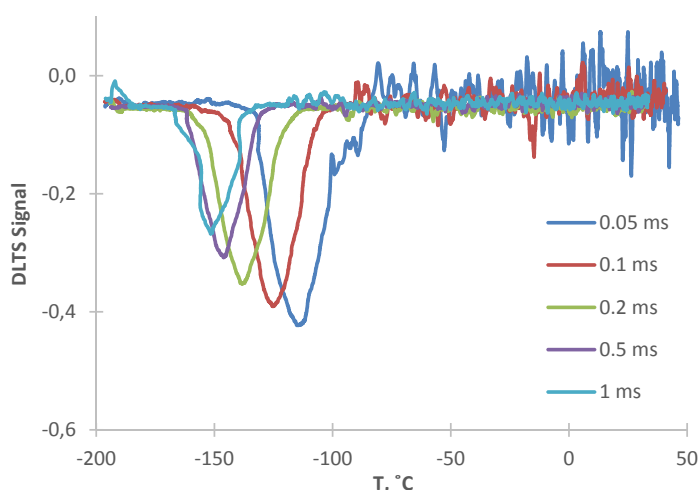


Рисунок 6 – Спектры НСГУ для германиевого диода Д18 при различных временных окнах

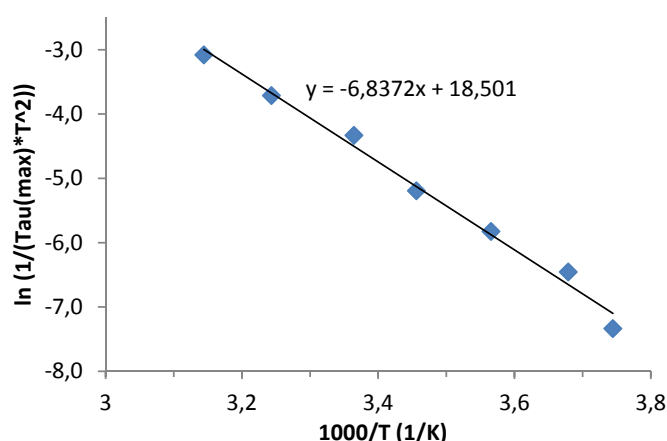


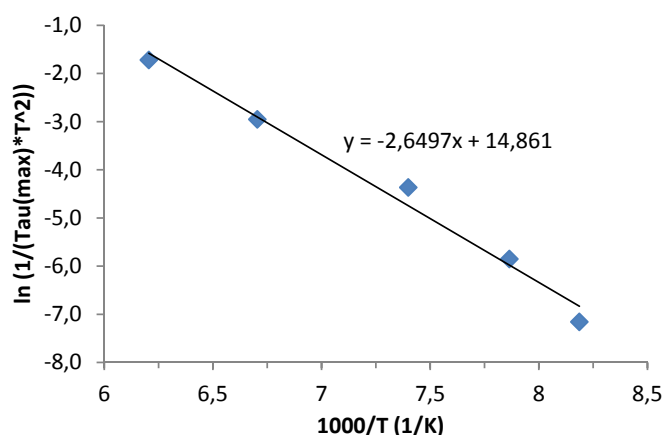
Рисунок 7 – График Аррениуса для определения основных характеристик глубоких уровней в кремниевом диоде КД223А

Выражение (6) позволяет определить энергию активации  $\Delta E_{ГУ}$  и сечение захвата носителей  $\sigma$  посредством построения графика Аррениуса в виде зависимости  $\ln(1/(\tau T^2))$  от  $1000/T$ . В этом случае тангенс угла наклона полученной прямой прямо пропорционален  $\Delta E_{ГУ}$ , а отрезок, отсекаемый полученной прямой на оси ординат, обратно пропорционален  $\sigma$ .

Из полученных графиков Аррениуса (см. Рисунки 7 и 8) на основании выражения (6) можно определить энергию активации и сечение захвата наблюдаемых на спектрах НСГУ глубоких уровней. В таблице 2 представлены полученные результаты для кремниевых диода Д223А и германиевого диода Д18.

В соответствии с литературными источниками, глубокие уровни у диода Д223А могут быть образованы попавшими в Si при изготовлении полупроводникового устройства атомами Zn или их комплексами с кислородом, а у диода Д18 – атомами Cu попавшими в Ge в процессе формирования барьерного контакта [7].

Таким образом, условия проведения эксперимента и полученные экспериментальные результаты позволяют сделать вывод, что дефекты, создающие наблюдаемые в рассматриваемых диодах глубокие уровни, локализованы. Данные дефекты работают как рекомбинационные центры, уменьшая время жизни носителей заряда и проводимость.



**Рисунок 8** – График Аррениуса для определения основных характеристик глубоких уровней в германиевом диоде Д18

**Таблица 2** – Основные параметры глубоких уровней для Д223А и Д18 диода

Параметры	Единица измерения	Диод Д223А	Диод Д18
Энергия активация	Е (eV)	0,59	0,23
Сечение захвата	$\sigma$ (см <sup>2</sup> )	$4,98 \times 10^{-13}$	$1,31 \times 10^{-14}$
Ёмкость диода (при температуре измерение от 80К до 300К)	$\Delta C$ (пФ)	0,713-0,769	0,437-0,690

В результате проведенных экспериментов, можно сделать вывод о пригодности DLS-спектрометра для исследования глубоких уровней в полупроводниковых структурах.

### Заключение

В настоящей статье приведен подход к реализации лабораторного эксперимента для студентов высших учебных заведений по применению методики нестационарной спектро-

скопии глубоких уровней к изучению полупроводниковых переходов в промышленных диодах. На основании приведенного в статье материала возможна разработка методического пособия для лабораторных работ. Мы надеемся, что применение данной методики в обучающих условиях лабораторного эксперимента в вузах позволит студентам развить широкий спектр теоретических знаний и экспериментальных навыков в области полупроводниковой физики.

### Литература

- 1 Берман Л.С., Лебедев А.А. Ёмкостная спектроскопия глубоких центров в полупроводниках. – Л.: Наука, 1981. – 176 с.
- 2 Lang D.V. Deep level transient spectroscopy: A new method to characterize traps in semiconductors // J. Appl. Phys. – 1974. – Vol. 45.
- 3 Булярский С.В., Грушко Н.В. Генерационно-рекомбинационные процессы в активных элементах. – М.: МГУ, 1995. – 391 с.
- 4 Boddaert X., Letartle X., Stevenard D., Bourgouin J. Thermal stability of EL2 in GaAs. // Add. Mater., Process and Devices III-V Compound Semicond.: Symp., Boston, Nov. 28-Dec. 2, 1988. – 1989. – Pittsbur. – P. 3-8.
- 5 Von Bardeleben H., Bourgouin J., Stevenard D., Lannoo M. On the metastable state of EL2 in GaAs. // Gallium arsenide and relat. compounds: Proc. 14th Int. Symp. Heraclion 28 Sept.-10 Oct. 1987. – 1988. – P. 399-452.

- 6 Литвинов В.Г. Автоматизированный измерительно-аналитический комплекс токовой релаксационной спектроскопии глубоких уровней. – Рязань: Рязанское ЦНТИ, информационный листок о НТР № 61-081-02. – 2002. – 4 с.
- 7 Зи С.М. Физика полупроводниковых приборов. В 2-х т. / Пер. с англ. – М.: Мир, 1984. – Т. 1. – 456 с.

#### References

- 1 L.S. Berman, A.A. Lebedev *Emkostnaya spektroskopiya glubokikh tsentrov v poluprovodnikakh*. – L.: Nauka, 1981, 176 p. (in russ.)
- 2 D.V. Lang, *J. Appl. Phys.*, 45, (1974).
- 3 S.V. Bulyarskiy, N.V. Grushko *Generatsionno-rekombinatsionnye protsessy v aktivnykh elementakh*. – М.: MGU, 1995, 391 s. (in russ.)
- 4 X. Boddaert, X. Letartle, D. Stevenard, J. Bourgouin, *Add. Mater., Process and Devices III-V Compound Semicond.: Symp.*, Boston, Nov. 28-Dec. 2, 1988, Pittsbur, 3-8, (1989).
- 5 H. Von Bardeleben, J. Bourgouin, D. Stevenard, M. Lannoo, *Gallium arsenide and relat. compounds: Proc. 14th Int. Symp. Heraclion 28 Sept.-10 Oct. 1987*, 399-452, (1988).
- 6 V.G. Litvinov *Avtomatizirovannyi izmeritel'no-analiticheskiy kompleks tokovoi relaksatsionnoi spektroskopii glubokih urovnei*. – Ryazan:' Ryazanskoye TsNTI, informatsionnyi listok o NTR No. 61-081-02, 2002, 4p. (in russ.)
- 7 S.M. Zi *Phizika poluprovodnikovykh priborov. V 2-kh t.*, М.: Mir, 1984, 1. 456.

**80 ЛЕТ!  
БУРАНБАЕВ МЭЛС  
ЖАКАНОВИЧ**

*Я люблю тебя жизнь,  
Я люблю тебя снова и снова.*

В феврале 2017 года исполнилось 80 лет доценту кафедры физики твердого тела и нелинейной физики физико-технического факультета Буранбаеву Мэлсу Жакановичу. В 1961 году он окончил физический факультет КазГУ им. С.М. Кирова, в 1970 г. – аспирантуру кафедры физики твердого тела физического факультета МГУ им. М.В.Ломоносова.

С 1961 по 1963 гг. Мэлс Жаканович успешно трудился в лаборатории физических методов исследования института металлургии и обогащения АНКазССР, с 1963 года работает на физическом факультете нашего университета с 1970 г. на должности старшего преподавателя, с 1998 г. – доцента кафедры физики твердого тела и нелинейной физики КазНУ им. аль-Фараби.

Буранбаев М.Ж. – специалист в области кристаллографии и рентгеноструктурного анализа, владеющий фундаментальными знаниями и методологией исследования в области физики твердого тела. Он является автором более 160 научных работ, опубликованных в научных журналах Казахстана, России и дальнего зарубежья. а также автором изобретений, имеющих патент Республики Казахстан.

Помимо активной научной работы, Мэлс Жаканович занимается преподавательской деятельностью – читает лекции по общим курсам «Физика твердого тела», «Введение в физику твердого тела и основы кристаллографии», «Физика конденсированных сред», «Физические свойства материалов», в магистратуре «Основы кристаллографии и структурный анализ», «Основы нанотехнологии в материаловедении», «Наноструктурные и нанокристаллические материалы», проводит лабораторные работы и практические занятия. Кроме того, руководит выпускными работами бакалавров и магистерскими диссертациями. Под руководством Мэлса Жакановича защищены кандидатские диссертации, защищено около 200 дипломных работ и порядка 30 магистерских диссертаций.

Чтение лекций осуществляется им на высоком научно-методическом уровне. Лекции, практические и лабораторные занятия Буранбаев М.Ж. проводит на казахском и русском языках.

---

Яркий представитель советской научной школы, Буранбаев Мэлс Жаканович, в то же время, является прогрессивным современным исследователем, не боящимся экспериментов и всегда идущим в ногу со временем.

Буранбаев М.Ж. активно участвует в общественной жизни университета, долгие годы был секретарем парторганизации факультета, в течение многих лет входил в состав метод бюро. Мэлс Жаканович уже многие годы защищает спортивную честь нашего факультета, являясь членом команды факультета по шахматам, которая занимает на университетских спартакиадах только призовые места.

Мэлс Жаканович пользуется огромным уважением среди сотрудников и студентов физико-

технического факультета, являясь неоспоримым авторитетом для одних и примером для других.

Говоря о человеческих качествах Мэлса Жакановича, надо сказать об его жизненном оптимизме, позитивном отношении к своим коллегам, студентам. Это человек – горячо любящий жизнь во всех ее проявлениях, готовый прийти на помощь любому, нуждающемуся в ней.

Желаем нашему дорогому Мэлсу Жакановичу крепкого здоровья, долгих лет жизни, еще больше научных побед и свершений!!!

**Байганатова Шолпан Бахытжановна**

*Алматы, 2017*

---

## МАЗМҰНЫ – СОДЕРЖАНИЕ

### 1-бөлім Раздел 1 Жылу физикасы және Теплофизика и теориялық жылу техникасы теоретическая теплотехника

*Жаврин Ю.И., Молдабекова М.С., Асембаева М.К., Федоренко О.В., Мукамеденкызы В.*  
Температурные зависимости эффективных коэффициентов диффузии для двух многокомпонентных газовых систем, содержащих воздух, водород и некоторые углеводороды .....

*Ситдиқов Ж.Ж., Мессерле В.Е., Устименко А.Б., Баймұлдин Р.В.*  
Технология переработки углеродсодержащих отходов.....

*Максимов В.Ю., Айдабол С.Қ., Отынишиева Н.А.*  
Тепломассоперенос при горении угольной пыли в камере сгорания энергетического котла БКЗ-75 Шахтинской ТЭЦ...

### 2-бөлім Раздел 2 Конденсирленген күй физикасы және Физика конденсированного состояния и материалтану проблемалары проблемы материаловедения

*Шинбаева А.К., Дробышев А.С., Рамос М., Соколов Д.Ю.*  
Коэффициенты преломления, плотность и поляризуемость криовакуумных конденсатов метана.....

*Мырзабекова М.М., Гусейнов Н.Р., Кудряшов В.В., Немкаева Р.Р., Ильин А.М.*  
Радиационная модификация графеновых структур и исследование физико-механических свойств композитов полученных на их основе .....

*Бакранова Д.И., Кукушкин С.А., Нусупов К.Х., Осипов А.В., Бейсенханов Н.Б.*  
Структура и фазовый состав эпитаксиальных пленок SiC, выращенных методом замещения атомов .....

*Мұрадов А.Д., Яр-Мухамедова Г.Ш., Мұхамбетова С.Б., Черязданов К.Б., Әмірханова К.М., Әліева Ж.А.*  
Полимидті қабыршақтың морфологиясына, оптикалық қасиеттеріне, молекулалық құрылымына шунгит толықтырғышының концентрациясының әсері .....

*Глеуқенов Е.О., Плотников С.В., Погребняк А.Д., Ердыбаева Н.К., Манапбаева А.Б.*  
Микроструктура, элементный и фазовый состав и физико-механические свойства нанокompозитных (Ti-Zr-Hf-V-Nb-Ta)N покрытий до и после имплантирования высокими дозами ионов азота .....

*Мархабаева А.А., Абдуллин Х.А., Лисицын В.М., Немкаева Р.Р.*  
Рамановская спектроскопия, фотолюминесценция и фотокаталитическая активность вольфрамата цинка.....

*Умирзаков А.Г., Мереке А.Л., Бейсенов Р.Е., Муратов Д.А., Рақыметов Б.А.*  
Импульсное лазерное напыление электролитического слоя YSZ полученного горячим прессованием мишени.....

*Немкаева Р.Р., Мухаметкаримов Е.С., Алпысбаева Б.Е.*  
Сравнение методик атомно-силовой микроскопии при исследовании аморфных углеродных пленок.....

### 3-бөлім Раздел 3 Конденсирленген күй физикасы және Физика конденсированного состояния и материалтану проблемалары проблемы материаловедения

*Жусупов М.А., Ибраева Е.Т., Кабатаева Р.С., Жаксыбекова К.А., Темирбаев Д., Кажыкенов Ш.*  
Упругое рассеяние протонов на ядрах  $^{13}\text{C}$  и  $^{15}\text{C}$  в дифракционной теории .....

*Дүйсебаев А., Дүйсебаев Б.А., Жолдыбаев Т.К., Садыков Б.М., Исмаилов К.М., Насурлла М., Бактораз А., Сильбаева А., Исмаилов Н.*  
Предравновесная эмиссия протонов и  $\pi$ -частиц в реакциях на ядре  $^{59}\text{Co}$  при  $E_p = 30$  МэВ .....

*Джунушалиев В.Д., Проценко Н.А.*  
Движение цветных заряженных частиц в SU(3) неабелевой модели темной материи .....

*Уразалина А.А., Джунушалиев В.Д., Синглетон Д.*  
Фантомные решения со скалярными полями в ОТО с различными потенциалами.....

---

**3-бөлім    Раздел 3**  
**Конденсирленген күй физикасы және    Физика конденсированного состояния и**  
**материалтану проблемалары    проблемы материаловедения**

*Жусупов М.А., Жусупов А.М., Кабатаева Р.С., Жаксыбекова К.А.*

Методика расчета характеристик экзотических атомов.....

*Бошқаев Қ.А., Жәми Б.А., Қалымова Ж.А.*

АҚ ергежейлі жұлдыздардың негізгі параметрлерін анықтауда Wolfram Mathematica бағдарламасын қолдану.....

*Аймаганбетов К.П., Жолдыбаев К.С., Жантуаров С.Р., Рахимбаев Б.С., \*Токмолдин Н.С.*

Реализация метода нестационарной спектроскопии глубоких уровней в условиях лабораторного эксперимента для студентов вузов.....

**Мерейтой - Юбилей**

*Байганатова Ш.Б.*

80 лет! Буранбаев Мэлс Жаканович .....



---

## CONTENTS

### Section 1 Thermal physics and theoretical thermal engineering

- Zhavrin Yu.I., Moldabekova M.C., Asembaeva M.K., Fedorenko O.V., Mukamedenkyzy V.*  
Temperature dependences of the effective diffusion coefficients for two multicomponent gaseous systems containing air, hydrogen and some hydrocarbons .....
- Sitdikov Zh.Zh., Messerle V.Ye., Ustimenko A.B., Baimuldin R.V.*  
Technology for processing carbon-containing waste .....
- Maximov V.Ju., Aidabol S.K., Otynshyeva N.A.*  
Heat and mass transfer in combustion of coal dust into the combustion chamber of the power boiler BKZ-75 of Shahtinskaya TPP .....

### Section 2 Condensed Matter Physics and Materials Science Problems

- Shinbayeva A.K., Drobyshev A.S., Ramos M., Sokolov D. Yu.*  
Refraction of coefficient, density and polarizability cryovacuum condensate of methane .....
- Myrzabekova M.M., Guseinov N.R., Kudryashov V.V., Nemkayeva R.R., Ilyin A.M.*  
Radiation modification of graphene structures and study of physical and mechanical properties of composites based on it .....
- Muradov A.D., Yar-Mukhamedova G.Sh., Mukhambetova S.B., Cheryazdanov K.B., Amyrkhanova K.M., Alyeva Zh.A.*  
Investigation of the influence of the concentration of the shungite filler on the optical properties, morphology and molecular structure of the polyimide film .....
- Bakranova D.I., Kukushkin S.A., Nussupov K.Kh., Osipov A.V., Beisenkhanov N.B.*  
The structure and phase composition of SiC epitaxial films, synthesized by atoms replacement .....
- Tleukenov Y.O., Plotnikov S.V., Pogrebnjak A.D., Erdybaeva N.K., Manapbayeva A.B.*  
Microstructure, elemental and phase composition and physical-mechanical properties of nanocomposite (Ti-Zr-Hf-V-Nb-Ta)N coatings before and after implantation of high doses of nitrogen ions .....
- Marhabaeva A.A., Abdullin Kh.A., Lisitsyn V.M., Nemkaeva R.R.*  
The raman spectroscopy, photoluminescence and photocatalytic activity of the zinc tungstate .....
- A.G. Umirzakov, A.L. Mereke, R.E. Beisenov, D.A. Muratov, B.A. Rakymetov*  
Pulsed laser deposition of YSZ electrolyte layer obtained by hot pressing of the target .....
- Nemkayeva R.R., Mukhametkarimov Y.S., Alpysbayeva B. Ye.*  
Comparison of atomic-force microscopy methods during the study of amorphous carbon films .....

### Section 3 Nuclear and Elementary Particle Physics

- Zhusupov M.A., Ibrayeva Ye.T., Kabatayeva R.S., Zhaksybekova K.A., Temirbayev D., Kazhykenov Sh.*  
Elastic proton scattering on  $^{13}\text{C}$  and  $^{15}\text{C}$  nuclei in the diffraction theory .....
- Duisebayev A., Duisebayev B.A., Zholdybayev T.K., Sadykov B.M., Ismailov K.M., Nassurlla M., Baktoraz A., Silybayeva A., Ismailov N.*  
Preequilibrium emission of protons and  $\alpha$ -particles in reactions on  $^{59}\text{Co}$  nucleus at proton energy of 30 MeV .....
- Dzhunushaliev V.D., Procenko N.A.*  
The motion of colored charged particles in the SU (3) non-Abelian model of dark matter .....
- Urazalina A., Dzhunushaliev V., Singleton D.*  
Phantom solutions with scalar fields in GR with different potentials .....

---

**Section 3**  
**Condensed matter physics and**  
**materials science problems**

*Zhusupov M.A., Zhusupov A.M., Kabatayeva R.S., Zhaksybekova K.A.*

Methodology of calculation of characteristics of exotic atoms .....

*Boshkayev K.A., Zhami B.A., Kalymova Zh.A.*

Application of Wolfram Mathematica program to the determination of the main parameters of white dwarf stars .....

*Aimaganbetov K.P., Zholdybayev K.S., Zhantuarov S.R., Rakhimbayev B.S., Tokmoldin N.S.*

Implementation of the method of deep level transient spectroscopy as a laboratory experiment for higher education students .

**Anniversary**

*Байганатова Ш.Б.*

80 лет! Буранбаев Мэлс Жаканович .....