ISSN 1563-034X Индекс 75877; 25877

ӘЛ-ФАРАБИ атындағы ҚАЗАҚ ҰЛТТЫҚ УНИВЕРСИТЕТІ

ХАБАРШЫ

Физика сериясы

КАЗАХСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ имени АЛЬ-ФАРАБИ

ВЕСТНИК

Серия физическая

AL-FARABI KAZAKH NATIONAL UNIVERSITY

RECENT CONTRIBUTIONS TO PHYSICS

№3 (62)

Алматы «Қазақ университеті» 2017



ХАБАРШЬ ФИЗИКА СЕРИЯСЫ №3 (62)



ISSN 1563-034X Индекс 75877; 25877

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 АЛКАСЫ:

Давлетов А.Е., әл-Фараби атындағы ҚазҰУ – ғылыми редактор (Қазақстан) Лаврищев О.А., ЭТФҒЗИ – ғылыми редактордың орынбасары (Қазақстан) Әбишев М.Е., әл-Фараби атындағы ҚазҰУ, ЭТФҒЗИ (Қазақстан) Аскарова Ә.С., әл-Фараби атындағы ҚазҰУ, ЭТФҒЗИ (Қазақстан) Воиfendi L., Орлеан к. университеті (Франция) Буртебаев Н., Ядролық физика институты (Қазақстан) Дробышев А.С., әл-Фараби атындағы ҚазҰУ, ЭТФҒЗИ (Қазақстан) Жаңабаев З.Ж., әл-Фараби атындағы ҚазҰУ, ЭТФҒЗИ (Қазақстан) Иващук В.Д., Халықтар достығы Ресей университеті (*Ресей*) Ishitsuka Е., Жапония атом энергиясы агенттігі (*Жапония*) Косов В.Н., Абай атындағы ҚазҰПУ (*Қазақстан*) Lunarska E., Польша ғылым академиясының физикалық химия институты (*Польша*) Safarik P., Прагада Чех техникалық университеті (*Чехия*) Тимошенко В.Ю., М.В. Ломоносов атындағы MMY (*Ресей*) Quevedo H., Мексика ұлттық автономиялық университеті (*Мексика*)

ТЕХНИКАЛЫҚ ХАТШЫ

Дьячков В.В., әл-Фараби атындағы ҚазҰУ (*Қазақстан*)



Ғылыми басылымдар бөлімінің басшысы *Гульмира Шаккозова* Телефон: +77017242911 E-mail: Gulmira.Shakkozova@kaznu.kz

Компьютерде беттеген Айгүл Алдашева

Жазылу мен таратуды үйлестіруші Керімқұл Айдана Телефон: +7(727)377-34-11 Е-mail: Aidana.Kerimkul@kaznu.kz

ИБ № 11619

Басуға 20.09.2017 жылы қол қойылды. Пішімі 60х84 ¹/₈. Көлемі 9,8 б.т. Офсетті қағаз. Сандық басылыс. Тапсырыс № 79. 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.

© Әл-Фараби атындағы ҚазҰУ, 2017

1-бөлім

ЖЫЛУ ФИЗИКАСЫ ЖӘНЕ ТЕОРИЯЛЫҚ ЖЫЛУ ТЕХНИКАСЫ

Раздел 1

ТЕПЛОФИЗИКА И ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ТЕПЛОТЕХНИКА

Section 1

THERMAL PHYSICS AND THEORETICAL THERMAL ENGINEERING МРНТИ 30.51.23; 30.17.27

Аскарова А.С., Болегенова С.А., Болегенова С.А., Максимов В.Ю., Бекетаева М.Т.*

Научно-исследовательский институт экспериментальной и теоретической физики, КазНУ им. аль-Фараби, Казахстан, Алматы, *e-mail: Beketayeva.m@gmail.com

ИССЛЕДОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ АЗОТИСТЫХ ВЕЩЕСТВ ПРИ ГОРЕНИИ УГОЛЬНОГО ТОПЛИВА

Процесс горения угольного топлива сопровождается сложными физико-химическими процессами, которые следует учитывать при численном исследовании первостепенно. При этом важную роль играет качество сжигаемого угольного топлива. От ранга угля зависит и выход летучих веществ, а также выход вредных продуктов сгорания, таких как оксиды углерода, оксиды азота и серы, и т.д. Образование оксида азота в пламени углеводородов происходит главным образом с помощью трех механизмов; тепловые NO (фиксация молекулярного азота атомами кислорода при высоких температурах), топливные NO (окисление азота, содержащегося в топливе во время сгорания), и быстрые NO (атака углеводородного радикала на молекулярный азот). Из этих трех механизмов топливные NO, безусловно, являются самым значительным источником NO в практических угольных пламенах. В настоящей работе с помощью кинетических схем формирования азотистых веществ был исследован процесс горения карагандинского угля в камере сгорания котла реального энергетического объекта. На основе полученных результатов и их верификаций был предложен наиболее приемлемый механизм образования NO, для проведения численных расчетов по горению твердого топлива на любых тепловых электрических станциях, использующие высокозольный казахстанский уголь. Результаты таких исследований позволит разрабатывать технические и конструкционные предложения по оптимизации процессов горения.

Ключевые слова: аэродинамика потоков, горение топлива, кинетический механизм, моделирование, NO_x, оксиды азота, тепломассоперенос

Askarova A.S., Bolegenova S.A., Bolegenova S.A., Maximov V.Yu., Beketayeva M.T.* Institute of Experimental and Theoretical Physics, Al-Farabi KazakhNU, Kazakhstan, Almaty, *e-mail: Beketayeva.m@gmail.com

Study of nitrogenous substances formation during combustion of coal

The process of burning coal fuel accompanied by complex physical and chemical processes that should been considered in the numerical study are paramount. An importance has the quality of combusted coal fuel. Coal rank depends on volatile substances, and outlet of harmful combustion products like carbon oxides, nitrogen and sulfur oxides and others. Nitric oxide formation in hydrocarbon flames occurs primarily through three mechanisms; thermal NO (the fixation of molecular nitrogen by oxygen atoms produced at high temperatures), fuel NO (the oxidation of nitrogen contained in the fuel during combustion), and prompt NO (the attack of a hydrocarbon radical on molecular nitrogen). Of these three mechanisms, fuel NO is by far the most significant source of NO in practical coal flames. In the work with the help of kinetic schemes of formation of nitrogenous substances was investigated Karaganda coal combustion process in the combustion chamber of the real energy boiler. Based on these results and their verification it had been offered the most appropriate mechanism of NOx formation for the base of numerical calculations at any thermal power stations that using high ash content Kazakh coal. The results of such research work may develop technical and constructional proposals for optimization of combustion processes.

Key words: aerodynamics of flow, fuel combustion, kinetic mechanism, modeling, $NO_{x'}$ nitrous oxides, heat mass transfer

Асқарова Ә.С., Бөлегенова С.Ә., Бөлегенова С.Ә., Максимов В.Ю., Бекетаева М.Т.*

Эксперименттік және теориялық физика ғылыми-зерттеу институты, әл-Фараби атындағы ҚазҰУ, Қазақстан, Алматы, *e-mail: Beketayeva.m@gmail.com

Көмірдің жануы кезінде азоттектес заттардың түзілуін зерттеу

Шаң-көмірлі отынды жағу процесі күрделі фиизка-химиялық процестермен бірге жүреді және оларды сандық зерттеулерде міндетті түрде ескеру қажет. Бұл ретте жағылатын көмір отынының сапасы маңызды болып табылады. Көмір рангі ушпа заттардың бөлінуі мен зиянды: көміртегі оксидтері, азот пен күкірт оксидтері тәріздес шығырлардың қаншалықты пайда болатындығына тікелей әсер етеді. Образование оксида азота в пламени углеводородов происходит главным образом с помощью трех механизмов; тепловые NO (фиксация молекулярного азота атомами кислорода при высоких температурах), топливные NO (окисление азота, содержащегося в топливе во время сгорания), и быстрые NO (атака углеводородного радикала на молекулярный азот). Из этих трех механизмов топливные NO, безусловно, являются самым значительным источником NO в практических угольных пламенах. Азоттектес заттардың түзілуіне қатысты кинетикалық сұлбалардың көмегімен ұсынылған жұмыста реалды энергетикалық объектінің жану камерасында қарағандылық көмірдің жану процесі зерттелді. Алынған зерттеу нәтижелері мен оларды верификациялау негізінде күлділігі жоғары қазақстандық көмірді жағатын кез-келген жылу электрлік станцияларда сандық экспериментті жүргізуде NO, түзілуінің неғұрлым оңтайлы механизмі ұсынылды. Мұндай зерттеулердің нәтижелері жану процестерін оңтайландыруда техникалық және конструкциялық ұсыныстарды жобалауға мүмкіндік береді.

Түйін сөздер: ағындар аэродинамикасы, отын жануы, кинетикалық механизм, моделдеу, NO, азот тотықтары, жылу масса тасымалдану

Введение

Горение пылеугольного топлива является сложным физико-химическим процессом, сопровождающимся выделением большого количества тепла и продуктов сгорания, где самыми вредными компонентами считаются азотосодержащие вещества. Во время цикла углефикации содержание азота в угле обычно составляет от 0,5–2%. Механизм горения угольного топлива проходит три этапа: нагрев и сушка, выход летучих веществ и сгорание коксового остатка (рисунок 1). При этом происходят интенсивные химические реакции с выделением продуктов сгорания с большими количествами энергии [1].

Задача горения угольного топлива

Окислы азота в пылеугольном факеле производятся десятками видов и сотнями участвующими химическими реакциями по основным трем механизмам. Термические воздушные оксиды азота образуются при высоких температурах, выше 1600°К по механизму Зельдовича (15%), быстрые воздушные оксиды азота образуются во фронте горения при сравнительно низких температурах ~ 1000°К (0,5%) и топливные оксиды азота (85%), которые все еще недостаточно изучены [2]. При нормировании выбросов в атмосферу и при их контроле представляют наибольший интерес изучение формирования окислов азота по топливному механизму.

При горении азота, органически связанного с топливом, должны учитываться все факторы, которые могут повлиять на протекание химических реакций между топливом и окислителем (кислород в составе воздуха). Такими факторами могут быть: размеры частиц, доля минеральной части в топливе (в частности зольность), избыток воздуха, чувствительность к малым температурным возмущениям в реакционной области и другие [3]. Исследования показали, что химическая кинетика для разного ранга углей при различных условиях вычисляются по различным кинетическим схемам [4].

В предложенной работе были проведены вычислительные эксперименты с использованием двух химических моделей формирования и деструкции окислов азота: De Soete и Mitchell-Tarbell. Для моделирования горения был выбран уголь Карагандинского бассейна, который характеризуется высокой степенью зольности (выше 35%). Его химический состав: С – 33.87%, H₂ – 6.63%, S – 1.92%, N₂ – 2.23%, O₂ – 9.65%, W – 10.60%, A – 35.1%. Горение топлива была смоделирована для камеры сгорания реальной энергетической установки [5].



Рисунок 1 – Этапы горения угольной частицы

Результаты численного моделирования

В результате исследований были получены расчетные данные по аэродинамике высокотемпературных потоков, температурные и концентрационные поля. Ниже представлены трехмерные рисунки движения потоков и температурные поля в объеме топочной камеры.

На рисунке 2 показаны траектории высокореагирующих потоков в объеме камеры сгорания. Максимальное значение вектора полной скорости, равное 15,4 м/с, имеются в области горелок, где подаются топливо-воздушные потоки противоточном направлении. В этой области температурные поля (рис.2б) реагирующих потоков напротив имеют малые значения (158°С). По высоте топки видно, что вектор полной скорости потоков имеет турбулентный характер в нижней части камеры и установившийся характер в верхней части, что связано с динамикой смешивания топлива и окислителя [6]. Однако, анализируя рисунок 2б, можно заметить, что температура в центральной области имеют максимальные значения (ядро факела – 1350°С), а к выходу температура потоков понижается до ~ 930°С.



Рисунок 2 – Траектории реагирующих потоков в объеме котла а) вектор полной скорости; б) температура

Численное исследование процессов массопереноса концентрации NO_x основано на решении трехмерных уравнений конвективного тепломассопереноса с учетом конвективного и радиационного теплообмена, химической кинетики и двухфазности среды [7-8]. Эти нелинейные уравнения состоят из закона сохранения массы и импульса (уравнение Навье-Стокса), закона сохранения энергии и вещества [9-10].

Анализируя следующие рисунки За,б распределения концентрации моноксида углерода, можно отметить, что использование той или иной модели практически не влияет на их формирование. В сечении Z=3,98 м (рисунок 3а), в области расположения пояса горелок среднее значение концентрации оксида углерода равно 1,36×10⁴ мг/нм³, а на выходе из камеры сгорания (рисунок 3б) значение концентрации СО в среднем равно 529 мг/нм³.

Далее показаны результаты 3Д моделирования процессов массопереноса при формировании оксидов азота по двум кинетическим моделям. Выбор наиболее правильно описывающей модели процесса производства и подавления азотосодержащих веществ может быть актуальной при проведении численных исследований с целью получения наиболее реальных данных, которые могут использоваться при оценке характера процессов горения в существующих топочных устройствах, а также при разработках новых конструкторских и технологических решений для минимизаций вредных выбросов.





Рисунок 3 – Трехмерные распределения концентрации оксидов углерода СО в камере сгорания котла по двум кинетическим схемам: Mitchell-Tarbell и De Soete

Анализируя рисунок 4 трехмерных полей концентраций оксидов азота NO_x , можно заметить, что на выходе из камеры сгорания концентрация оксидов азота NO_x для двух указанных моделей отличаются. Это обусловлено тем, что

кинетическая модель De Soete [11] производит численный расчет формирования NO_x по химической схеме, которая используется при сжигании высококачественных углей (высокая степень углефикации, малая доля зольности, сернистости и влажности). А модель Mitchell-Tarbell [12] в основном предназначена для расчетов концентраций NO_x при горении низкокачественных

углей. Разность в средних значениях концентраций оксидов азота NO_x по указанным моделям составляет ~ 25%.



Рисунок 4 – Распределение концентрации оксидов азота NO_x на выходе из топочной камеры котла по двум кинетическим моделям: Mitchell-Tarbell и De Soete

На рисунке 5 показаны кривые средних значений концентраций оксидов азота NO_x по моделям Mitchell-Tarbell и De Soete. Также здесь нанесены значения оксидов азота NO_x, полученные на ТЭЦ [13], а также значение предельно-допустимой концентрации для для углесжигающих тепловых электрических станций Республики Казахстан [14].



Рисунок 5 – Распределения средних значений концентрации оксидов азота NO_x по высоте топки котла для двух моделей (Mitchell-Tarbell и De Soete) и ее верификация

Анализируя данные, можно заметить, что экспериментальные точки натурного эксперимента и значение ПДК ближе к значениям, которые были получены при использовании в численном расчете модели Mitchell-Tarbell.

Заключение

Анализируя полученные результаты, можно утверждать, что процесс тепломассопереноса в химически реагирующих потоках зависит от аэродинамической картины и тепловых характеристик процесса горения. В заключение можно отметить, что использование при численных исследованиях кинетических моделей формирования концентрационных характеристик имеет значительное влияние на образование оксидов азота NO... На выходе из топочной камеры расчетное значение концентрации NO по модели Mitchell-Tarbell равно 613 мг/нм³, а по модели De Soete – 463 мг/нм³. Сравнения с известными данными [13-14] показало, что результаты численного расчета концентрационных полей NO, по модели Mitchell-Tarbell более адекватно описывает реальный процесс массопереноса во время сжигания высокозольного казахстанского пылеугольного топлива.

Литература

1 Askarova A., Bolegenova S., Maximov V., at al. 3-D Modeling of Heat and Mass Transfer during Combustion of Solid Fuel in BKZ-420-140-7C Combustion Chamber of Kazakhstan // Journal of Applied Fluid Mechanics. – 2016. – Vol. 9(2). – P.699-709.

2 Glarborg P., Jensen A., Johnsson J. Fuel nitrogen conversion in solid fuel fired systems // Progress in Energy and Combustion Science. – 2003. – Vol. 29(2). – P.89-113.

3 Pershing D.W., Wendt J.O.L. Pulverized coal combustion: the influence of flame temperature and coal composition on thermal and fuel NOx // Int. Symposium on Combustion. The Combustion Institute. – 1976. – Vol. 16. – P.389-404.

4 Smith P.J., Hill S.C., Smoot L.D. Theory for NO formation in turbulent coal flames // 19th Symposium (Intern.) on Combustion. The Combustion Institute. – 1982. – P.1263-1270.

5 Askarova A., Maximov V., Beketayeva M., Safarik P., et al. Numerical Modeling of Pulverized Coal Combustion at Thermal Power Plant Boilers // Journal of thermal science. – 2015. – Vol.24(3). – P.275-282.

6 Leithner R., Müller H. CFD studies for boilers. Second M.I.T. // Conf. on Computational Fluid and Solid Mechanics. Cambridge. – 2003. – P.172-187.

7 Полежаев В.И., Буне А.В. и др. Математическое моделирование конвективного тепломассообмена на основе уравнения Навье-Стокса. – М.: Наука, 1982. – 272 с.

8 Варнаац Ю., Маас У. Горение. Физические и химические аспекты. – М.: Физматлит, 2003. – 352 с.

9 Askarova A., Bolegenova S., Beketayeva M., et al. Computational method for investigation of solid fuel combustion in combustion chambers of a heat power plant // High temperature. -2015. -Vol. 5(5). -P.751-757.

10 Müller H. Numerische Simulation von Feuerungen. CFD-Vorlesung, TU. Braunschweig: IWBT, 1997. - 8 p.

11 De Soete G. Overall reaction rates of NO and N2 formation from fuel nitrogen // 15th Intern. symposium on combustion. Pittsburgh. – 1975. – P.1093-1102.

12 Mitchell J., Tarbell J. A kinetic model of nitric oxide formation during pulverized coal combustion // AIChE Journal. – 1982. – Vol.28. – P.302-320.

13 Алияров Б.К., Алиярова М.Б. Сжигание казахстанских углей на ТЭС и на крупных котельных: опыт и перспективы. – Алматы, 2011. – 306 с.

14 RND 34.02.303-91 Отраслевая инструкция по нормированию внешних факторов в атмосфере для тепловых электротехнических и котельных. Астана, 2005. – 36 с.

References

1 Askarova, S. Bolegenova, V. Maximov, at al., Journal of Applied Fluid Mechanics 9(2), 699-709, (2016).

2 P. Glarborg, A. Jensen and J. Johnsson, Progress in Energy and Combustion Science 29(2), 89-113, (2003).

3 D.W. Pershing and J.O.L. Wendt, Proc. of the Stationary Source. Combustion Symposium (Pittsburgh, June, 1976), p.389-404.

4 P.J. Smith, S.C. Hill, and L.D. Smoot, Proc. of 19th Symposium (International) on Combustion (Haifa, 8-13 August, 1982), p.1263-1270.

5 A. Askarova, V. Maximov, M. Beketayeva, P. Safarik, and et al., Journal of thermal science 24(3), 275-282, (2015).

6 R. Leithner and H. Müller, Proc. of 2nd M.I.T. Conference on Computational Fluid and Solid Mechanics (Cambridge, 17 – 20 June, 2003), p.172-187.

7 V.I. Polezhaev, A.V. Bune i dr., Matematicheskoe modelirovanie konvektivnogo teplomassoobmena na osnove uravneniy Navie-Stoksa, (Moscow, 1987), 272 p. (in Russ.)

8 Yu. Varnaats and U. Maas, Gorenie. Fizicheskie i khimicheskie aspekti, (Moscow, 2003), 352 p. (in Russ.)

A. Askarova, S. Bolegenova, M. Beketayeva, and et al., High temperature 5(5), 751-757, (2015).

10 H. Müller, CFD. Vorlesung, (TU, 1997), 8 p.

11 G. De Soete, Proc. of 15th international symposium on combustion, (Pittsburgh, August, 1975), p.1093-1102.

12 J. Mitchell and J. Tarbell, AIChE Journal 28, 302-320, (1982).

13 B.K. Aliarov and M.B. Aliarova, Szhiganie kazahstanskih uglei na TEC i na krupnih kotelnih: opyt i perspektivi (Almaty, 2011) 306 s. (in Russ.)

14 RND 34.02.303-91 Otraslevaya instruktsiya po normirovaniyu vrednykh vybrosov v atmosferu dlya teplovykh elektrostantsiy i kotel'nykh, (Astana, 2005), 36 s. (in Russ.).

МРНТИ 29.19.22; 29.19.16

Дробышев А.С., Соколов Д.Ю., Шинбаева А.К., Нурмукан А.Е., Дуйсебаев Т.С.*

НИИЭТФ, Казахский национальный университет им.аль-Фараби, Казахстан, Алматы, *e-mail: Tola.d@yandex.ru

ПЛОТНОСТЬ ТОНКИХ ПЛЕНОК КРИОВАКУУМНЫХ КОНДЕНСАТОВ МЕТАНА

В данной работе исследована зависимость плотности ρ криоконденсатов метана CH₄ от температуры конденсации Т. Нами предлагаются к рассмотрению результаты, полученные непосредственно в ходе криоконденсации образцов, находящихся в существенно неравновесном состоянии. Попытке выяснению природы этих неравновесных состояний и посвящена данная работа. Данные значения плотности ρ метана CH₄ с уменьшением температуры конденсации Т претерпевают разрыв в окрестности температуры фазового перехода, связанный с вымораживанием степеней свободы у четверти молекул. Незначительное уменьшение плотности метана с понижением температуры конденсации связано с увеличением пористости образцов твердого метана с понижением температуры конденсации. Погрешность измерения плотности ρ не превышает 4-5% и определяется, в основном, погрешностью измерения остаточного давления газообразного метана в калибровочном объеме, а также случайной погрешностью. Результаты можно использовать в астрофизических исследованиях.

Ключевые слова: фазовый переход, криоконденсат, плотность, метан, температура конденсации.

Drobyshev A.S., Sokolov D.Yu., Shinbayeva A.K., Nurmukan A.Y., Duisebayev T.S.* IETP, Al-Farabi Kazakh National University, Kazakhstan, Almaty, *e-mail: Tola.d@yandex.ru

Density of thin films of cryovacuum condensates of methane

In this paper, the dependence of the density ρ of cryocondensates of methane CH₄ from the condensation temperature T is studied. We propose to consider the results obtained directly during the cryocondensation of samples in a substantially nonequilibrium state. This work dedicated to attempt to clarify the nature of the non-equilibrium state. These values of the density ρ of methane CH₄ with decreasing condensation temperature T undergoes rupture in the vicinity of the phase transition temperature associated with the freezing of degrees of freedom of a quarter of molecules. A slight decrease in the density of methane with decreasing condensation temperature associated with an increase in porosity of samples of solid methane with decreasing condensation temperature. The error in measuring the density ρ does not exceed 4-5% and is determined mainly by the error in measuring the residual pressure of gaseous methane in the calibration volume, and also by a random error. These results can be used in astrophysical research.

Key words: phase transition, cryocondesate, density, methane, temperature of condensation.

Дробышев А.С., Соколов Д.Ю., Шинбаева А.К., Нұрмұқан Ә.Е., Дүйсебаев Т.С.* ЭТФҒЗИ, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Қазақстан, Алматы, *e-mail: Tola.d@yandex.ru

Метан криовакуумды конденсаттарының жұқа қабықшасының тығыздығы

Бұл жұмыста CH₄ метан крионконденсаттар ρ тығыздығының T температура конденсациясына тәуелділігі зерттелген. Біз өте тепе-теңсіз күйде болған үлгілердің тура криоконденсация

процесс барысында алынған нәтижелерді ұсынамыз. Осындай тепе-теңсіз күйлердің табиғатын анықтауға осы жұмыс бағытталған. Алынған СН₄ метан ρ тығыздығының мәндері Т температура конденсациясының төмендеуі кезінде, температураның фазалық ауысу шекарасында ажырауға ұшырауы молекулалардың төрттен бірінде еркіндік дәрежесінің мұздатылуына байланысты. ρ тығыздығының өлшеу қателігі 4-5%-дан аспайды, және, негізінде, конденсация температурасының төмендеуінен қатты метан үлгісінің кеуектілігінің артуына, сонымен қатар, кездейсоқ қателегіне байланысты. Бұл нәтижелерді астрофизикалық зерттеулерде қолдануға болады.

Түйін сөздер: фазалық ауысу, криконденсат, тығыздық, метан, конденсация температурасы.

Введение

Твердый метан уже почти сто лет привлекает к себе пристальное внимание исследователей, и этот интерес не ослабевает по настоящее время, чему имеются веские и разноплановые причины. Отправной точкой этой длительной исследовательской истории справедливо можно считать обнаружение в 1929 году Клаусом Клузиусом (Klaus Clusius) [1] аномального поведения теплоемкости метана при температуре T=20,4 К. Позднее James and Keeman [2] теоретически показали, что обнаруженная аномалия является следствием фазового перехода от ориентационно разупорядоченной высокотемпературной фазы метана (α -фаза) к частично упорядоченной фазе при температуре ниже Т=20,4 К (β-фаза). Позднее было обнаружено [3-5], что β-фаза является промежуточным состоянием твердого метана на пути к полному ориентационному упорядочению (у-фаза).

Особенности свойств твердого метана, как структурных, так и иных (оптических, теплофизических, механических) во многом обусловлены спин-ядерными релаксационными процессами и их влиянием на вращательную и трансляционную подсистемы кристаллической решетки метана. Изучение этих процессов проводились 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, 17].

В настоящей статье представлены результаты исследования влияния температуры криоконденсации метана на величину коэффициентов преломления и плотности образующихся тонких пленок. В отличии от достаточно большого числа исследований этих параметров для равновесных образцов твердого метана [6, 16-18], нами предлагаются к рассмотрению результаты, полученные непосредственно в ходе криоконденсации образцов, находящихся в связи с этим в существенно неравновесном состоянии. Попытке выяснению природы этих неравновесных состояний и посвящена данная работа.

Измерения проведены в окрестностях температуры фазового перехода Т=20,4 К в интервале от 12 К до 32 К. Основная идея проведения этих исследований заключалась в следующем. Переход из ориентационно разупорядоченной α -фазы в частично упорядоченную β-фазу и обратно меняет характер взаимодействия излучения с молекулами метана в части изменения вклада вращательной подсистемы в этот процесс. 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 межмолекулярного обмена в твердой фазе метана также остаются еще до конца не понятыми [19, 20], таким образом, исследования неравновесных состояний твердого метана могут способствовать этому пониманию.

Эксперимент и методика измерений

В данной работе мы использовали газообразный метан производства компании IHSAN ТЕСНNOGAZ 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.



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

В центре камеры расположена подложка диаметром 60 мм, установленная на верхнем фланце микрокриогенной машины Gifford-McMahon. Измерение температуры конденсации осуществлялись кремниевым датчиком TS 670-1.4 и термоконтроллером 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 см⁻¹ – 4200 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 $T_c=16$ К. Далее камера перекрывалась и с помощью системы натекания в вакуумную камеру осуществлялся напуск метана. 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 определить 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 $P = 1,2*10^{-4}$ Тор. Верхняя интерферограмма получена при нормальном угле падения $\beta = 0^0$ (черная кривая), а нижняя интерферограмма (красная кривая) 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*=16 К ; давлении газовой фазы *P*=1,2*10⁻⁴ Тор. α =45⁰ , $\Delta \tau$ =24,4 sec; β =0⁰ , $\Delta \tau$ =20,4 sec

Для измерения толщины криоконденсатов применялся широко используемый метод лазерной интерферометрии, основанный на интерференции излучения лазера, отраженного от поверхности подложки и от границы раздела криокристалл-газ (рисунок 3). В нашем случае использовался He-Ne-лазер с длиной волны излучения $\lambda = 0,6328$ мкм.

Рисунок 3 – Лазерно-интерферометрическое измерение роста толщины криокристалла

В данном случае применялся двухлучевой лазерный интерферометр с различными углами падения луча на подложку. Это давало возможность, используя, полученные в процессе конденсации интерферограммы, определять не только толщину пленки, но и коэффициент преломления образца. На основании полученных в процессе конденсации интерферограммы роста, соответствующие двум различным углам падения, рассчитывается показатель преломления криокристалла:

$$n = \sqrt{\frac{\Delta t_1^2 \sin^2 \alpha_1 - \Delta t_2^2 \sin^2 \alpha_2}{\Delta t_1^2 - \Delta t_2^2}}, \quad (1)$$

здесь α_1 и α^2 – углы падения лазерных лучей интерферометра, Δt_1 и Δt_2 – соответствующие периоды. Зная коэффициент преломления n, порядок интерференции m, угол падения *m*, длину волны излучения α , толщину криокристалла r и скорость роста υ можно рассчитать массу и плотность :

$$m=\frac{\Delta PV\mu}{RT}, \rho=\frac{m}{Sd}$$

Плотность криоконденсатов метана

Были определены значения плотности в зависимости от температуры криоосаждения. Эти данные приведены на рисунке 4. Измерения проведены в интервале температур от T = 14 K до T = 30 K и давлении газовой фазы $P = 10^{-4}$ Top. Величина давления выбрана из тех соображений, чтобы обеспечить необходимое пересыщение газовой фазы при температурах конденсации вблизи линии равновесия. Погрешность измерения плотности ρ не превышает 4-5 % и определяется, в основном, погрешностью измерения остаточного давления газообразного метана в калибровочном объеме, а также случайной погрешностью.



Рисунок 4 – Зависимость плотности твердого метана от температуры конденсации. Давление конденсации P=10⁻⁴ Tor

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]. В частности в [6] рентгеновским методом измерены параметры решетки твердого метана в окрестностях температуры α-β-перехода (Т=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.

Результаты и обсуждения

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 К. Как мы уже отмечали [2-5], при этой температуре реализуется переход от ориентационно разупорядоченной высокотемпературной фазы метана (α – фаза) к частично упорядоченной фазе (β – 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].

Что касается плотности криоконденсатов метана, то измеренные нами значения находятся в хорошем согласии с данными авторов, работающих по схожей с нами методике. Отсутствие особенностей в температурной зависимости плотности в окрестности T=20 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.

Литература

1 Clusius Uber die Spezifische K.A. Warme einiger kondensierter Gase Zwischen 100 abs.und ihrem Triplpunkt // Z. Phys. Chem. – 1929. – Vol.3. – P.41-79.

2 James H.M. and Keenan T.A. Theory of phase transitions in solid heavy methane // J. Chem. Phys. -1959. -Vol.31. -P.12-41.

3 Colwell J.H., Gill E.K. and Morrison J.A. Thermodynamic properties of CH4 and CD4. Interpretations of the properties of the solids // J. Chem. Phys. – 1963. – Vol.39. – P.635-653.

4 Kruis H.A., Popp L. and K. Clusius Über Umwandlungen in festen Hydriden und Deuteriden // Z. Elektrochem. – 1937. – Vol. 43, Iss.8. – P.664-666.

5 Bartholorne E., Drikos G. and Eucken A. Die Umwandlungen von festem CD4 und seiner Mischungen mit CH4 // Z. Phys. Chern. – 1938. – Vol.39. – P.371-373.

6 Прохватилов А.И., Исакина А.П. Параметры решетки, коэффициенты теплового расширения и плотность вакансии в твердом СН4 // Физика низких температур. – 1983. – Т.9. – С.419-427.

7 Baer D.R., Fraass B.A., Riehl D.H, Simmons R.O. Lattice parameters and thermal expansion of solid CD4 // J. Chem. Phys. - 1978. - Vol. 68 (4). - P.1411.

8 Nijman A.J., Trappeniers N.J. A High Pressure NMR Study of Solid Methane // Physica. - 1978. - Vol.95B. - 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. 45(16). – P.1712.

10 Buchman S., Candela D., Wetterling W.T., Pound R.V. Spin Species Conversion Rate in Solid CH4 in the temperature range 4-23K // Phys. Rev. B. - 1982. - Vol.26. - P.198-209.

11 Chapados C., Cabana A. Infrared Spectra and Structure of Solid CH4 and CD4 in phases I and II // Can. Jour. of Chem. – 1972. – Vol.50. – P.3521-3533.

12 Miyamoto Y., Fushitani M., Ando D. and Momose T. Nuclear Spin Conversion of Methane in Solid Parahydrogen // J. of Chem. Phys. - 2008. - Vol.128. - P.14502.

13 Багацкий М.И., Манжелий В.Г., Мащенко Д.А., Дудкин В.В. Теплоемкость твердых растворов дейтерометана в криптоне. Спин-ядерная конверсия молекул CD4 // Физика низких температур. – 2003. – Т.29. – С.1352-1362.

14 Bagatskii M.I., Manzhelii V.G., Minchina I.Ya., Mashchenko D.A., Gospodarev I.A. Rotational Excitations in Concentrated Solid Kr-CH4Solutions: Calorimetric Studies // Jour. of Low Temp. Phys. –2003. – Vol.130, Iss.5-6. – P.459-475.

15 Pisarska E., Stachwiak P., Jezowski A. Observation of relaxation of molecular spins in CH4CH4 and CD4CD4crystals in thermal conductivity experiment // Fizika nizkich temperature. – 2007. – Vol.33, N 6/7. – P.768

16 Manzhelii V.G. and Tolkachev A.M. Densities of Ammonia and Methane in the Solid State // Phys. Solid State. – 1963. – Vol.5. – P.3413-3419.

17 Martonchik J. and Orton G. Optical constants of liquid and solid methane // Applied Optics. - 1994. - Vol.12. - P.1-30.

18 Ramsey W.H. On the densities of methane, metallic ammonium, water and neon at planetary pressures // Royal Astr. Soc. – 1963. – Vol.125. – P.469-485.

19 Nijman J., Berlinsky A.J. Theory of Nuclear Spin Conversion in the β Phase of Solid Methane // Phys. Rev. Lett. – 1977. – Vol.8. – P.408-411.

20 Nijman J., Berlinsky A.J. Theory of nuclear spin conversion in β - phase of solid CH4 // Can. Jour. of Phys. – 1980. – Vol.58. – P.1049-1069.

21 Wood E. and Roux J.A. Infrared optical properties of thin H2O, NH3, and CO2 cryofilms // J. Opt. Soc. – 1982. – Vol.72. – P.720-728.

References

- 1 K.A. Clusius, Z. Phys. Chem. 3, 41-79, (1929).
- 2 H.M. James and T.A. Keenan, J. Chem. Phys. 31, 12-41, (1959).
- 3 J.H. Colwell, E.K. Gill and J.A. Morrison, J. Chem. Phys. 39, 635-653, (1963).
- 4 H A. Kruis, L. Popp and K. Clusius, Z. Elektrochem. 43(8), 664-666, (1937).
- 5 E. Bartholorne, G. Drikos and A. Eucken, Z. Phys. Chern. 39, 371-373, (1938).
- 6 A.I. Prokhvatilov and A.P. Isakina, Fizika nizkikh temperature 9, 419-427, (1983). (in Russ).
- 7 D.R. Baer, B.A. Fraass, D.H. Riehl and R.O. Simmons, J. Chem. Phys. 68 (4), 1411, (1978) doi.org/10.1063/1.435960.
- 8 A.J. Nijman and N.J. Trappeniers, Physica B 95, 147-162, (1978).
- 9 P.A. Beckman, M. Bloom and I. Ozier, Can. Jour. of Phys., 45 (16), 1712, (1976). doi.org/10.1139/p76-204.

10 S. Buchman, D. Candela, W.T.Wetterling and R.V.Pound, Phys. Rev. B 26, 198-209, (1982).

- 11 C. Chapados and A. Cabana, Can. Jour. of Chem. 50, 3521-3533, (1972).
- 12 Y. Miyamoto, M. Fushitani, D. Ando and T. Momose, J. of Chem. Phys. 128, 14502, (2008). doi.org/10.1063/1.2889002.
- 13 M.I. Bagatskiy, V.G. Manzheliy, D.A. Mashchenko and V.V. Dudkin, Fizika nizkikh temperatur 29, 1352-1362, (2003).
- 14 M.I. Bagatskii, V.G. Manzhelii, I.Ya. Minchina and D.A. Mashchenko, I.A. Gospodarev, Jour. of Low Temp. Phys. 130

- 15 E. Pisarska, P. Stachwiak and A. Jezowski, Fizika nizkich temp., 33 (6/7), 768, (2007).
- 16 V.G. Manzhelii and A.M. Tolkachev, Phys. Solid State 5, 3413-3419, (1963).
- 17 J. Martonchik and G. Orton, Applied Optics 12, 1-30, (1994).

18 W. H. Ramsey, Royal Astr. Soc. 125, 469-485, (1963).

- 19 J. Nijman and A.J. Berlinsky, Phys. Rev. Lett. 8, 408-411, (1977).
- 20 J. Nijman and A.J. Berlinsky, Can. Jour. of Phys. 58, 1049-1069, (1980).
- 21 E. Wood and J.A. Roux, J. Opt. Soc. 72, 720, (1982). doi.org/10.1364/JOSA.72.000720

^{(516), 459, (2003).} doi.org/10.1023/A:1022463618264.

МРНТИ 29.17.15; 29.17.35

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

Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Казахстан, Алматы, *e-mail: mukameden@inbox.ru

ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ЗАВИСИМОСТИ ЭФФЕКТИВНЫХ КОЭФФИЦИЕНТОВ ДИФФУЗИИ для двух многокомпонентных газовых систем, содержащих воздух, водород и некоторые углеводороды

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.

Zhavrin Yu.I., Moldabekova M.C., Asembaeva M.K., Fedorenko O.V., Mukamedenkyzy V.* Al-Farabi Kazakh National University, Kazakhstan, Almaty, *e-mail: mukameden@inbox.ru Temperature dependences of the effective diffusion coefficients for two multicomponent gaseous systems containing air, hydrogen and some hydrocarbons

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, masstransfer.

Жаврин Ю.И., Молдабекова М.С., Әсембаева М.К., Федоренко О.В., Мұқамеденқызы В.* Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Қазақстан, Алматы, *e-mail: mukameden@inbox.ru Курамында ауа, сутегі және кейбір көмірсутектері бар

құрамында ауа, сутегі және кейоір көмірсутектері бар екі көпкомпонентті газ қоспалары үшін эффективті диффузия коэффициенттерінің температуралық тәуелділігі

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.

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 п-бутана. Полученные результаты позволят полнее раскрыть механизм диффузионного процесса в сложных газовых смесях с изменением температуры, дать оценку переносу каждого компонента и суммарного массопереноса в целом.

Поставленную задачу о расчете переносных и других свойств газов и их смесей с учетом влияния термодинамических параметров (в дан-

ном 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

$$\boldsymbol{D}_{Ti}^{\boldsymbol{s}\boldsymbol{\phi}} = \boldsymbol{D}_{\boldsymbol{\theta}i}^{\boldsymbol{s}\boldsymbol{\phi}} \left(\frac{T}{T_{\boldsymbol{\theta}}}\right)^{n_{i}}, \qquad (1)$$

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

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

$$j_i = -D_i^{\phi} \frac{dc_i}{dx}, \qquad (2)$$

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 [7-11].

В литературе приводится ряд записей выражений для ЭКД. Мы будем использовать выражение из работ (см., например, [12]), которое легко проверяется в диффузионных экспериментах.

$$D_{i}^{\phi} = D_{ii}^{*} + \sum_{\substack{j=l \ i\neq i}}^{\kappa-l} D_{ij}^{*} \frac{dc_{j}}{dc_{i}}, \qquad (3)$$

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 0 и L на границах диффузионного слоя

$$\overline{D}_{i}^{s\phi} = \overline{D}_{ii}^{*} + \sum_{\substack{j=l\\j\neq i}}^{\kappa-l} \overline{D}_{ij}^{*} \left(\frac{c_{j}^{L} - c_{j}^{\theta}}{c_{i}^{L} - c_{i}^{\theta}} \right).$$
(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 [13]. Конструкция аппарата, приборов и узлов, входящих в экспериментальную установку, а также методика работы детально описаны в [14]. Первый аппарат имел следующие параметры: объемы верхней и нижней колб – $V_{e} = V_{\mu} = 76,9 \text{ см}^{3}$; длина и диаметр диффузионного канала L =7,055 см и d = 0,4 см, а второй – $V_{e} = V_{\mu} = 62,0$ см³; длину и диаметр канала L = 7,055 см и d =0,330 см соответственно. Комплекс геометрических размеров, так называемая постоянная прибора $B = L_{s\phi} \cdot V_{e} \cdot V_{\mu} / S \cdot (V_{e} + V_{\mu})$, (здесь S – площадь поперечного сечения канала, а $L_{s\phi}$ – эффективная длина диффузионного канала [15]) для первого аппарата была равна – 2215 см², а для второго – 2653 см². В представленных ниже расчетах использовался аппарат, постоянная которого была равна 2500 см².

В данной работе через численный эксперимент были определены показатели степеней температурных зависимостей ЭКД компонентов для систем: 1. $H_2(1) - 0.25CH_4(2) + 0.25C_2H_6(3) + 0.25C_3H_8(4) + 0.25n-C_4H_{10}(5)$ и 2. Air(1) – 0.2H₂(2) + 0.2CH₄(3) + 0.2C_2H_6(4) + 0.2C_3H_8(5) + 0.2n-C_4H_{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 К и давлении равном 0,101 МПа.

Ограничения, которые при работе с этими системами необходимо было соблюдать, принято 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 $D_{\theta i}^{2\phi}$ для каждого компонента смеси при $T_0 = 298$ 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-H₂, Air-CH₄, Air-C₂H₆, Air-C₃H₈, Air-n-C₄H₁₀, C₂H₆-C₃H₈, C₂H₆-n-C₄H₁₀, C₃H₈-n-C₄H₁₀. Поэтому пришлось обратиться к рекомендации

[16] «Однако
$$\boldsymbol{D}_{T_1} = \boldsymbol{D}_{T_2} \left(\frac{T_2}{T_1}\right)^{1/2}$$
 приближенно

отображает зависимость **D** от **T**. Эта формула дает лучшие результаты, 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 [17-21] (см. ниже таблицу 1).

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

Пала	Температура, К							
пара газов (степень температурной	298	400	500	600	700	800	900	
зависимости, ссвыка)	Коэффициенты взаимной диффузии, см ² /с							
CH ₄ -H ₂ (1,81,[17])	0,705	1,201	1,799	2,503	3,308	4,213	5,214	
CH ₄ -C ₂ H ₆ (1,70,[17])	0,154	0,253	0,370	0,505	0,656	0,823	1,005	
CH ₄ -C ₃ H ₈ (1,89,[17])	0,125	0,218	0,332	0,469	0,627	0,807	1,008	
$CH_4 - n-C_4H_{10}(1,57,[17])$	0,106	0,168	0,239	0,317	0,404	0,499	0,600	
$C_2H_6 - H_2(1,71,[17])$	0,577	0,954	1,397	1,908	2,483	3,121	3,818	
$C_{3}H_{8} - H_{2}(1,71,[17])$	0,448	0,741	1,084	1,481	1,928	2,423	2,964	
$n-C_4H_{10} - H_2(1,64,[17])$	0,378	0,613	0,884	1,192	1,535	1,910	2,317	
$C_2H_6 - C_3H_8$ (1,80,[16,21])	0,078	0,131	0,196	0,271	0,358	0,456	0,563	
$C_2H_6 - n - C_4H_{10} (1, 80, [16, 21])$	0,067	0,112	0,168	0,233	0,307	0,390	0,483	
$C_{3}H_{8} - n-C_{4}H_{10}(1,81,[16,21])$	0,051	0,085	0,127	0,176	0,233	0,296	0,366	
Air-H ₂ (1,81,[16,21])	0,773	1,317	1,972	2,744	3,626	4,618	5,715	
Air-CH ₄ (1,75,[16,21])	0,217	0,363	0,537	0,739	0,967	1,222	1,501	
Air-C ₂ H ₆ (1,80,[16,21])	0,144	0,245	0,366	0,508	0,670	0,852	1,053	
Air-C ₃ H ₈ (1,80,[16,21])	0,111	0,189	0,282	0,391	0,516	0,657	0,812	
Air-n-C ₄ H ₁₀ (1,80,[16,21])	0,079	0,134	0,201	0,278	0,368	0,467	0,578	

В дальнейшем КВД из таблицы 1 использовались для определения $D_i^{\phi\phi}$ 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 2 – ЭКД и показатели степеней температурных зависимостей компонентов системы $H_2(1) - 0.25CH_4(2) + 0.25C_2H_6(3) + 0.25C_3H_8(4) + 0.25n-C_4H_{10}(5)$ для начального распределения концентраций в интервале температур 298-900 К

	ЭКД компонентов, см ² /с								
	Показатели степеней температурных зависимостей								
Газы	Температура, К								
1 usbi	298	400	500	600	700	800	900	<n></n>	
H ₂	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	
CII	0,562	0,936	0,773	1,889	1,889	3,108	3,809		
СП4		1,733	1,733	1,732	1,732	1,732	1,731	1,732	
C ₂ H ₆	0,511	0,848	0,482	1,695	1,695	2,771	3,390		
		1,719	1,714	1,713	1,712	1,712	1,712	1,714	
C ₃ H ₈	0,478	0,788	1,935	1,568	1,568	2,555	3,121		
		1,696	1,696	1,698	1,70	1,699	1,698	1,70	
n-C4H10	0,460	0,753	0,992	1,491	1,491	2,419	2,949		
		1,674	1,678	1,680	1,681	1,681	1,681	1,68	

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 $0.5H_2 + 0.125CH_4 + 0.125C_2H_6 + 0.125C_3H_8 + 0.125n-C_4H_{10}$.

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]). 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 [21]). Иначе можно сделать грубые ошибки.

Таблица 3 – ЭКД и показатели степеней температурных зависимостей компонентов системы Air(1) – 0,20H₂(2) + 0,20CH₄(3) + 0,2C₂H₆(4) + 0,2C₃H₈(5) + 0,20n-C₄H₁₀(6) для начального распределения концентраций в интервале температур 298-900 К

				Температу	/ра, К				
Газы	ЭКД компонентов, см ² /с								
	Показатели степеней температурной зависимости								
	298	400	500	600	700	800	900	<n></n>	
Air	0,198	0,334	0,498	0,688	0,905	1,147	1,415		
		1,781	1,782	1,765	1,768	1,769	1,770	1,773	
H ₂	0,643	1,081	1,601	2,206	2,894	3,660	4,502		
		1,763	1,760	1,761	1,761	1,760	1,761	1,761	
CH4	0,160	0,270	0,393	0,539	0,704	0,888	1,089		
		1,765	1,736	1,736	1,735	1,736	1,735	1,741	
C ₂ H ₆	0,093	0,160	0,241	0,337	0,447	0,572	0,710		
		1,837	1,848	1,846	1,843	1,840	1,839	1,842	
C ₃ H ₈	0,064	0,108	0,166	0,232	0,309	0,396	0,493		
		1,805	1,854	1,850	1,851	1,852	1,853	1,844	
n-C4H10	0,030	0,055	0,087	0,124	0,170	0,220	0,279		
		2,034	2,053	2,028	2,031	2,018	2,018	2,030	

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. – 2006, № 2 (22). – С. 73-79.

5. Zhavrin Yu.I., Kosov N.V., Poyarkov I.V., Asembaeva M.K. Fedorenko O.V., Nysanbaeva A.T. Temperature dependences of the effective diffusion coefficients of the component of three-component gas systems, used in the synthesis of ammonia // J. Eng. Phys. Therm. – 2013. – Vol. 86, No. 3. – P. 676-680.

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. Wilke C.R. Properties of multicomponent gases // Chem. Eng. Prog. - 1950. - Vol. 46. - P. 95-104.

9. Kaminskii V.A. Special modes of three-component diffusion in gases // Rus. J. Phys. Chem. A. - 2011. - Vol. 85, No. 12. - P. 2203-2208.

10. Zhavrin Y.I., Kosov N.D., Novosad Z.I. Effective diffusion coefficient methods for studying description of non-stationary diffusion in multicomponent gas mixtures // ZhFKh. – 1975. – Vol. 49, No. 3. – P. 706-709.

11. Lightfoot E.N. Transport phenomena and living systems: Biomedical aspects of momentum and mass transport. – London: John Wiley & Sons – Interscience, 1974. – 520 p.

12. 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.

13. Andrew S.P.S. A simple Method of Measuring Gaseous Diffusion Coefficient // Chem. Eng. Sci. – 1955. – Vol. 4. – P. 269-272.

14. 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.

15. Калинин Б.А., Лойко А.Э., Суетин 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.

16. Bretsznajder S. Wlasnosci Gazow I Cieczy. - Warsaw: Wydawnictwo Naukovo - Techniczne, 1962.

17. 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»).

18. Bogatyrev A.F., Nezovitina M.A. The experimental study of temperature dependence of binary diffusion coefficients of gases at different pressures // Int. J. Therm. – 2013. – Vol. 34, No. 11. – P. 2065-2075.

19. Bogatyrev A.F., Nezovitina M.A. Interdiffusion coefficients of gaseous systems // J. Eng. Phys. Therm. – 2012. – Vol. 85, No. 5. – P. 1208-1214.

20. Seleznev V.D., Smirnov V.G. Diffusion of 3-component mixture of gases in 2-bulb system // ZhTekhFiz. - 1981. - Vol. 51, No. 4. - P. 795-800.

21. Bird R.B., Stewart W.E., Lightfoot E.N. Transport Phenomena. – New York: John Wiley & Sons, Inc., 2002. – 688 p.

References

1 N.D. Kosov, Ju.I. Zhavrin and Z.I. Novosad, *Teplofizicheskie svojstva veshhestv i materialov*, (Moscow: Izd-vo standartov, 1982), pp. 86-112. (in Russ).

2 A.G. Bychkov and Ju.I. Zhavrin Temperaturnaja zavisimost' jeffektivnyh kojefficientov diffuzii nekotoryh smesej v izotermicheskih i neizotermicheskih uslovijah (Alma-Ata: NII JeTF Kaz.un-t, 1993. Dep. V KazNIIKI. 15.01.93. № 3985. Ka-93), 10 p. (in Russ).

3 Ju.I. Zhavrin, N.D. Kosov and Z.I. Novosad, *Diffuzija v gazah i zhidkostjah* (Alma-Ata: MV i SSO KazSSR, 1974), pp.12-19. (in Russ).

4 Ju.I. Zhavrin, V.Ju. Zhavrin, V.N. Kosov and 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 and M.K. Asembaeva, Vestnik KazNU, serija fizicheskaja, **1** (36), 71-75, (2011). (in Russ).

6 Ju.I. Zhavrin, V.N. Kosov, M.K. Asembaeva, I.V. Pojarkov and 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)

8 C.R. Wilke, Chem. Eng. Prog. 46, 95-104, (1950).

9 V.A. Kaminskii, Rus. J. Phys. Chem. A 85, 12, 2203-2208, (2011).

10 Y.I. Zhavrin, N.D. Kosov, Z.I. Novosad, ZhFKh. 49, 3, 706-709, (1975).

11 E.N. Lightfoot *Transport phenomena and living systems: Biomedical aspects of momentum and mass transport* (London: John Wiley & Sons, Interscience, 1974), 520 p.

12 Z.I. Novosad and N.D. Kosov, ZhTF 40, 11, 2368-2375, (1970). (in Russ).

13 S.P.S. Andrew, Chem. Eng. Sci. 4, 269-272, (1955).

14 Ju.I. Zhavrin, N.D. Kosov, S.M. Belov, N.I. Semidockaja, Teplomassoperenos v zhidkostjah i gazah. (Alma-Ata, 1982), 3-12. (in Russ).

15 B.A. Kalinin, A.Je. Lojko, P.E. Suetin, Diffuzija v gazah i zhidkostjah, (Alma-Ata, 1972), 79-85. (in Russ).

16 S. Bretsznajder, *Wlasnosci Gazow I Cieczy*, (Warsaw: Wydawnictwo Naukovo – Techniczne, 1962).

17 A.F. Bogatyrev and M.A. Nezovitina, *Aktual'nye voprosy issledovanij plastovyh sistem mestorozhdenij uglevodorodov:* cb. nauch. st. (Moscow: Gazprom VNIIGAZ, 2014), **2**, 18, 55-58. (in Russ).

18 A.F. Bogatyrev and M.A. Nezovitina, Int. J. Therm. 34, 11, 2065-2075, (2013).

19 A.F. Bogatyrev and M.A. Nezovitina, J. Eng. Phys. Therm. 85, 5, 1208-1214, (2012).

20 V.D. Seleznev and V.G. Smirnov, ZhTekhFiz. 51, 4, 795-800, (1981).

21 R.B. Bird, W.E. Stewart and E.N. Lightfoot, Transport Phenomena (New York: John Wiley & Sons, Inc., 2002), 688 p.

2-бөлім **ПЛАЗМА ФИЗИКАСЫ**

Раздел 2 **ФИЗИКА ПЛАЗМЫ**

Section 2 PLASMA PHYSICS

МРНТИ 29.27.07

Шаленов Е.О.*, Джумагулова К.Н., Рамазанов Т.С., Джумагулов М.Н.

НИИЭТФ, Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Казахстан, Алматы, *e-mail: shalenov.erik@mail.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ВОЗБУЖДЕНИЯ ВНУТРЕННИХ СОСТОЯНИЙ АТОМА ВОДОРОДА

В данной работе представлены процессы возбуждения электронных уровней атома водорода при электронном ударе. Вычислены сечения возбуждения при разных значениях безразмерных параметров плазмы, определяющих состояние системы. Для теоретического исследования процессов возбуждения электронных состояний атома использовался метод квантовой механики. Для нахождения фазовых сдвигов было решено уравнение Калоджеро с эффективным потенциалом взаимодействия между электроном и атомом в частично ионизованной водородной плазме. Этот эффективный потенциал учитывает квантовомеханический эффект дифракции на маленьких расстояниях, эффект экранировки на больших расстояниях, и имеет конечное значение на расстояниях близких к нулю. Сечение возбуждения определялось с помощью интегрирования дифференциального сечения рассеяния по углам рассеяния, минимальный угол рассеяния соответствовал при этом столкновению с передачей энергии, равной энергии возбуждения. Полученные результаты показали хорошее согласие с экспериментальными данными.

Ключевые слова: сечения рассеяния, сечения возбуждения, неидеальная квазиклассическая плазма, уравнение Калоджеро, эффективный потенциал взаимодействия.

Shalenov E.O.*, Dzhumagulova K.N., Ramazanov T.S., Dzhumagulov M.N IETP, al-Farabi Kazakh national university, Kazakhstan, Almaty, *e-mail: shalenov.erik@mail.ru

Investigation of the excitation of the internal states of hydrogen atom

In this paper, the processes of the excitation of electron levels of hydrogen atom in an electron impact are presented. Excitation cross sections for different values of plasma dimensionless parameters are calculated that determine the state of the system. The method of quantum mechanics was used to theoretically study the processes of excitation of electron states of atom. To find the phase shifts, the Calogero equation was solved with an effective interaction potential between electron and atom in partially ionized hydrogen plasma. This effective potential takes into account the quantum-mechanical diffraction effect at small distances, the screening effect at large distances, has a finite value at distances close to zero. The excitation cross section was determined by integrating the differential scattering cross section over the scattering angles, the minimum scattering angle corresponding to this collision with the energy transfer equal to the excitation energy. The obtained results showed good agreement with the experimental data.

Key words: scattering cross section, excitation cross section, nonideal semiclassical plasma, equation Calogero, effective interaction potential.

Шаленов Е.О.*, Жұмағұлова Қ.Н., Рамазанов Т.С., Жұмағұлов М.Н.

ЭТФҒЗИ, әл-Фараби атыңдағы Қазақ ұлттық университеті,

Қазақстан, Алматы, *e-mail: shalenov.erik@mail.ru

Сутегі атомының ішкі күйлерінің қозу процесін зерттеу

Бұл жұмыста электрондық соққы кезінде сутегі атомының электрондық деңгейлерінің қозу процестері көрсетілген. Жүйенін күйін анықтайтын плазма өлшемсіз параметрлерінің әр түрлі

мәндері үшін қозу қималары есептелінді. Атомның электрондық күйлерінің қозу процестерін теориялық тұрғыдан зерттеу үшін кванттық механика әдісі пайдаланылды. Фазалық ығысуды анықтау үшін жартылай иондалған сутек плазмасындағы электрон мен атом арасындағы эффективті әсерлесу потенциалымен Калоджеро теңдеуі шешілді. Бұл эффективті потенциал аз арақашықтықта кванттық механикалық дифракция эффектісін, ал үлкен арақашықтықта экрандалу эффектісін ескереді, ал нөлге жақын арақашықтықта шекті мәнге ие. Дифференциалдық қозу қимасын шашырау бұрышы бойынша интегралдау көмегімен қозу қимасы анықталды, минимал шашырау бұрышы қозу энергиясына тең энергия беретін соқтығысқа сәйкес келеді. Алынған нәтижелер эксперименттік мәліметтермен жақсы келісім береді.

Түйін сөздер: шашырау қимасы, қозу қимасы, идеалды емес квазиклассикалық плазма, Калоджеро теңдеуі, эффективті әсерлесу потенциалы.

Введение

Атомные столкновения в горячей плотной плазме являются предметом постоянного интереса в последние несколько десятилетий. Наибольший интерес определяется проблемами спектроскопии такой плазмы и поэтому процессы, связанные с электронным ударом (возбуждение, ионизация, рекомбинация и т.д.), получают большое внимание. Эти исследования охватывают как слабо, так и сильно неидеальную плазму. В случае слабой связи с хорошим приближением является приближение Дебая-Хюккеля, учитывающее эффект экранировки в плазме. Однако, в сильно неидеальной плотной плазме помимо эффекта экранировки сильное влияние оказывает квантовомеханические эффекты, такие как эффект дифракции. В плотной плазме среднее расстояние между частицами уменьшается и волновые свойства проявляются сильнее.

Проблема определения сечений возбуждения атомов электронным ударом связана с проблемой определения сечения ионизации атома электронным ударом. Одной из первых формул для ионизации атома электронным ударом явилась формула Томсона (1912 г.). Ее вывод был основан на представлениях классической механики и электродинамики. Ионизация атома представляется в виде формулы:

$$e^- + A \rightarrow 2e^- + A^+. \tag{1}$$

Томсон исходил из представления, что столкновение электрона происходит с валентным электроном атома, которому в результате столкновения передается энергия E > I (I - энергия ионизации). В момент столкновения связью валентного электрона и атома можно пренебречь. Для энергии, переданной атому

электроном в зависимости от угла рассеивания θ , записывается следующая формула:

$$\Delta E = 0.5 \left(m \upsilon_1^2 / 2 \right) \cdot \left(1 - \cos \theta \right) =$$

$$= 0.5 \cdot E \left(1 - \cos \theta \right)$$
(2)

После интегрирования выражения для $d\sigma$ от энергии ионизации I до энергии налетающего электрона E получается следующее выражение ($E = mv_1^2/2$):

$$\sigma_{i} = \int_{\Delta E=I}^{\Delta E=E} d\sigma = \frac{\pi e^{4}}{E} \left(\frac{1}{I} - \frac{1}{E}\right).$$
(3)

Для сечения ионизации атома водорода электронным ударом формула Томсона имеет вид:

$$\sigma_i = \frac{\pi e^4}{E} \left(\frac{1}{I} - \frac{1}{E} \right). \tag{4}$$

Впоследствии был получен универсальный вид формулы Томсона при учете безразмерной функции f(x) для атома, имеющего n валентных электронов:

$$\sigma_i = \frac{n\pi e^4}{I^2} f\left(\frac{E}{I}\right),$$

$$f(x) = \frac{10(x-1)}{x(x+8)}, \quad x = \frac{E}{I}.$$
(5)

В работах [1-4] были исследованы теоретические и экспериментальные данные, касающиеся упругого рассеяния, образования позитрония, дискретных сечений возбуждения и ионизации при столкновении позитронов с атомами водорода. В работе [6] представлены теоретические расчеты углового дифференциального и полного сечения возбуждения для перехода 1s-2s при столкновений позитрона с атомом водорода. В решении этой задачи использовалась поляризованная орбитальная модель искаженной волны (DWPO) и метод классических траекторий Монте-Карло (СТМС) [6]. Метод СТМС используется для теоретического описания процессов ионно-атомных столкновений, а также для исследования столкновения позитрона с атомом [7-8]. Основное отличие метода СТМС состоит в учете всех реакционных каналов, которые могут быть приняты во внимание в рамках классической динамики. Для DWPO модели дифференциальное сечение возбуждения для атома водорода представлено в следующем виде:

$$\frac{d\sigma_{21}}{d\Omega} = \frac{4}{k_1^3 k_2} \left| \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \exp i(\delta_1^l + \delta_2^l) \int_0^\infty g_2^l(r) V_{21}(r) u_1^l(r) dr P_1(\cos\theta) \right|^2, \tag{6}$$

где $P_1(\cos \theta)$ – полином Лежандра первого рода, l – орбитальное число, $u_1^l(r)$ и $g_2^l(r)$ – радиальная волновая функция, k – волновой вектор налетающей частицы, δ – фазовые сдвиги. Угловое интегрирование сечения возбуждения представлено в следующем виде:

$$\sigma_{21} = \frac{16}{k_1^3 k_2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left[\int_0^{\infty} g_2^l(r) V_{21}(r) u_1^l(r) dr \right]^2.$$
(7)

Для метода СТМС дифференциальные и полные сечения вычисляются по следующим формулам:

$$\frac{d\sigma_{exc}}{d\Omega} = \frac{2\pi b_{\max} \sum_{j} b_{j}^{(exc)}}{N\Delta\Omega},$$
(8)

$$\sigma_{exc} = \frac{2\pi b_{\max} \sum_{j} b_{j}^{(exc)}}{N}, \qquad (9)$$

где N – общее число траекторий, рассчитанных для прицельных параметров меньше, чем b_{\max} , $b_j^{(exc)}$ – прицельные параметры для сечения возбуждения, $\Delta\Omega$ – телесный угол.

В работах [9-10] было исследовано сечение возбуждения ДЛЯ перехода 1s→2s при столкновении протонов с атомами водорода при энергиях в пределах 5 - 26 кэВ/ а.е.м. (а.е.м.= атомная единица массы). В следующих работах представлены теоретические расчеты при разных энергиях: низких [11-17], промежуточных [15-17] и высоких [18-20]. В работах [9, 21-23] представлены экспериментальные данные сечения возбуждения для перехода 1s→2р при столкновении протонов с атомами при энергиях в интервалах 0.6-700 кэВ/а.е.м. и теоретические расчеты показаны в работах [12-17, 20]. В работе [24] даны экспериментальные расчеты полного сечения возбуждения для перехода 1s→(n=2) в диапазоне энергий 16 – 200 кэВ / а.е.м., также былы сравнены с другими теоретическими данными [15-17, 25], которые согласуются с экспериментальными данными в пределах 10 – 15%.

Оценки сечений возбуждения на основе эффективного потенциала взаимодействия электрона с атомом

Перейдем теперь к описанию квантовомеханических методов исследования процессов рассеяния. Общий подход в вычислениях сечений рассеяния в квантовомеханическом описании заключается в анализе изменения волновой функции частицы после столкновения, если до столкновения она была известна.

Метод парциальных волн был предложен Факсеном и Хольцмарком и аналогичен подходу, развитому Рэлеем в классической теории рассеяния. Отправной точкой является уравнение Шрёдингера для частицы, рассеивающейся некоторым центральным полем с потенциалом $U(r) = \frac{2m}{\hbar^2} \Phi(r)$. Решение

уравнения Шредингера ищется в виде

$$\psi(r) \to \exp(ikz) + \frac{\exp(ikr)}{r} f(\mathcal{G}), \quad (10)$$

которое на больших расстояниях описывает падающую плоскую волну (распространяющуюся вдоль оси z) и расходящуюся сферическую волну; здесь k - модуль волнового вектора рассеивающейся частицы, 9 - угол между направлениями рассеянной (\vec{k}') и падающей волн (\vec{k}) . Величина $f(\mathcal{G})$, имеющая размерность получила название длины, амплитуды рассеяния, дифференциальное сечение рассеяния равно:

$$d\sigma = \left| f(\vartheta) \right|^2 d\Omega = \left| f(\vartheta) \right|^2 \sin \vartheta d\vartheta d\varphi.$$
(11)

Решение уравнения Шредингера позволяет определить величину, количественно описывающую эффект рассеяния, так называемую фазу рассеяния $\delta_{l}(k)$ (фазовый сдвиг). Можно перейти от уравнения Шредингера к уравнению непосредственно для фазы рассеяния. Уравнение для нахождения фазовых функций $\delta_i(k,r)$ имеет вид:

$$\begin{cases} \frac{d\delta_l^{\alpha\beta}(k,r)}{dr} = -\frac{1}{k} U(r) \Big[\cos \delta_l^{\alpha\beta}(k,r) \cdot J_l(kr) - \sin \delta_l^{\alpha\beta}(k,r) \cdot n_l(kr) \Big]^2, \\ \delta_l^{\alpha\beta}(k,0) = 0, \end{cases}$$
(12)

здесь J₁(kr) и n₁(kr) – функции Риккатти – Бесселя. Фазовые сдвиги находятся из решения уравнения (12) для $\delta_{i}(r)$ на больших расстояниях: $\delta_l^{\alpha\beta}(k) = \lim_{r \to \infty} \delta_l^{\alpha\beta}(k,r).$

Уравнение (12) впервые было получено Друкаревым, Кинчем, Ольсоном и Калоджеро [26].

В выражении (13) амплитуда рассеяния находится через сдвиги фаз на бесконечном удалении частиц друг от друга как:

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [\exp(2i\delta_l(\infty)) - 1] P_l(\cos(\theta))$$
(14)

(13)

где $P_l(\cos(\theta) - \text{есть полином Лежандр } l$ -го $\delta_i(\infty)$ – порядка, фазовый слвиг на бесконечности [27].

Отметим, что хотя уравнение для фаз рассеяния эквивалентно уравнению Шредингера, оно имеет ряд преимуществ. Основным преимуществом метода фазовых функций является то, что решение фазового уравнения хоть и имеет свои определенные трудности, но все же проще решения уравнения Шредингера. Кроме заметно уменьшается количество того. операций и, следовательно, время счета.

Исследование взаимодействия между частицами и разных свойств плазменных систем представляет большой интерес во многих областях физики. Оно также важно для развития технологий, связанных с применением плазмы. Мы использовали разработанный нами ранее оригинальный потенциал взаимодействия между электроном и атомом в частично ионизованной водородной плазме, который был представлен в работах [28]. Этот и другие авторские потенциалы взаимодействия частиц неидеальной плазмы получили широкое применение при исследовании свойств квазиклассической плазмы среди ученых ближнего и дальнего зарубежья и имеют большой индекс цитируемости. Этот эффективный потенциал учитывает квантово-механический эффект дифракции на маленьких расстояниях, эффект экранировки на больших расстояниях, имеет конечное значение на расстояниях близких к нулю. Он имеет следующий вид:

$$\Phi_{ea}(r) = -\frac{e^2 \alpha}{2r^4 \left(1 - 4\lambda_{ea}^2/r_d^2\right)} \left(e^{-Br} \left(1 + Br\right) - e^{-Ar} \left(1 + Ar\right)\right)^2$$
(15)
$$A^2 = \left(1 + \sqrt{1 - 4\lambda_{ea}^2/r_D^2}\right) / 2\lambda_{ea}^2 \qquad B^2 = \left(1 - \sqrt{1 - 4\lambda_{ea}^2/r_D^2}\right) / 2\lambda_{ea}^2$$

=

 $\lambda_{ea} = \hbar / (2\pi\mu_{ea}k_BT)^{1/2}$ – длина волны де-Бройля, $r_D = \sqrt{k_BT / (8\pi ne^2)}$ – радиус Дебая, k_B – постоянная Больцмана, $\mu_{ea} = m_e m_a / (m_e + m_a) \approx m_e$ приведенная масса атома и электрона, α – коэффициент электронной поляризуемости, для атома водорода $\alpha = 4.5a_B^3$, $a_B = \hbar^2 / (m_e e^2)$ радиус Бора.



Рисунок 1 – Зависимость дифференциального сечения рассеяния электрона на атоме водорода от угла при $\Gamma = 0.7$, $k = 0.8 a_s^{-1}$



Рисунок 2 – Зависимость дифференциального сечения рассеяния электрона на атоме водорода от угла при $\Gamma = 0,7, r_s = 5$

Численные результаты расчетов дифференциального сечения рассеяния для различных параметров плазмы приведены на рисунках 1-2.

Из сравнения этих рисунков следует, что дифференциальное сечение рассеяния сильно зависит от параметра плотности и от параметра связи, а также k. С ростом энергии налетающего электрона дифференциальное сечение рассеяния убывает быстрее при фиксированных параметрах связи и плотности (см. рисунок 2).

Обмен энергий между налетающим (с энергией E_k) и атомным электронами учитывается на основе законов сохранения энергии и импульса, которые приводят к следующей связи между передаваемой энергией ΔE_k и углом рассеяния:

$$\Delta E_{k} = E_{exc} \Longrightarrow E_{exc} = E_{k} \sin^{2}\left(\frac{\theta_{\min}}{2}\right) \Longrightarrow \theta_{\min} = 2 \arcsin\left(\sqrt{\frac{E_{exc}}{E_{k}}}\right).$$
(16)

Найденное дифференциальное сечение рассеяния используется для вычисления сечения возбуждения. При этом нижний предел интегрирования по углам рассеяния заменяется минимальным углом, определяемым соотношением (16):

$$\sigma_{exc} = 2\pi \int_{\theta_{\min}}^{\pi} d\sigma(\theta) \sin(\theta) d\theta. \quad (17)$$

На рисунке 3 приведены результаты численного расчета сечения возбуждения в зависимости от энергии электронов на основе потенциала (15) для разных параметров плазмы.



a)
$$\Gamma = 0.6$$
, $r_s = 2$; 6) $\Gamma = 0.3$, $r_s = 2$; b) $\Gamma = 0.1$, $r_s = 10$; Γ) $\Gamma = 0.1$, $r_s = 5$.

Рисунок 3 – Сечение возбуждения в атоме водорода при столкновении с электронами в зависимости от энергии электронов на основе потенциала (15)



1 – экспериментальные данные [29]; 2 – вычисления на основе потенциала (15);

Рисунок 4 – Сечение возбуждения в атоме водорода при столкновении с электронами в зависимости от энергии электронов

Анализ проведенных зависимостей сечения возбуждения квазиклассической плазмы от безразмерных параметров плазмы показывает, что сечение возбуждения увеличивается с уменьшением параметра плотности r_s (плотность увеличивается) и уменьшением параметра связи Γ . Этот факт, очевидно, связан с усилением влияния корреляционных эффектов на экранировку поля. При фиксированных значениях параметра плотности и параметра связи сечение возбуждения было сравнено с экспериментальными данными [29]. На рисунке 4 можно увидеть хорошее согласие экспериментальных и теоретических данных.

Заключение

На основе эффективного потенциала взаимодействия частиц неидеальной квазиклассической плазмы, который учитывает эффект экранировки поля заряженных частиц на больших расстояниях и эффект дифракции на малых расстояниях, был исследован процесс возбуждения атома.

На основе полученных сдвигов фаз рассеяния рассчитаны дифференциальные и сечения возбуждения электронным ударом в рамках квантовомеханического подхода. Учет корреляционных эффектов приводит к более резкому снижению сечения возбуждения при больших энергиях налетающего электрона. Полученные результаты показали хорошее согласие с экспериментальными данными.

Благодарность: Работа была выполнена в рамках Гранта 3102/ГФ4 Министерства образования и науки Республики Казахстан.

Литература

1 Walters H.R.J. Positron scatteringby atomic hydrogen at intermediate energies: 1s-1s-2s and 1s-2p transitions // J. Phys. B. - 1988. - Vol. 21. - P. 1893-1906.

2 Kernoghan A.A., Robinson D.J.R., McAlinden M.T., Walters H.R.J. Positron scatteringby atomic hydrogen // J. Phys. B. – 1996. – Vol. 29. – P. 2089–2102.

3 Zhou S., Li H., Kaupilla W.E., Kwan C.K., Stein T.S. Measurements of total and positronium formation cross section for positrons and electrons scattered by hydrogen atoms and molecules // Phys. Rev. A. – 1997. – Vol. 55. – P. 361–368.

4 Jones G.O., Charlton M., Slevin J., Laricchia G., Koever A., Poulsen M.R., Nic Chormaic S. Positron impact ionization of atomic hydrogen // J. Phys. B. – 1993. – Vol. 26. – P. 483–488.

5 Lugosi L., Paripas B., Gyemant I.K., Tokesi K. Differential cross sections for positron impact excitation of hydrogen // Radiation Physics and Chemistry – 2003. – Vol. 68. – P. 199–203.

6 Olson R.E. n 1 distributions inA^{q+}+H electroncapture collisions // Phys. Rev. A. – 1981. – Vol. 24. – P. 1726–1733.

7 Shultz D.R., Reinhold C.O., Olson R.E. Large-angle scatteringin positron-helium and positron-krypton collisions // Phys. Rev. A. - 1989. - Vol. 40. - P. 4947-4958.

8 Tokesi K., Koever A. Electron capture to the continuum at 54.4 eV positron-argon collisions // J. Phys. B. – 1996. – Vol. 33. – P. 3067–3077.

9 Morgan T.G., Geddes J. and Gilbody H.B. Formation of H(2p) and H(2s) atoms in collisions of 2-26 kev protons with hydrogen atoms // J. Phys. B. – 1973. – Vol. 6. – P. 2118.

10 Chang Y.P. and Fite W.L. Cross section for production of the metastable H(2s) state in proton collision with atomic hydrogen // Phys. Rev. A. – 1977. – Vol. 16. – P. 933.

11 Kimura M.and Thorson W.R. Molecular-state studies of charge transfer in Li^{3+} -H, Be^{4+} -H and B^{5+} -H collisions // J. Phys. B: At. Mol. Phys. – 1983. – Vol. 16. – P. 1471.

12 Winter T.G. and Lin C.D. Triple-center treatment of electron transfer and excitation in p-H collisions // Phys. Rev. A. – 1984. – Vol. 29. – P. 567.

13 Janev R.K. and Krstic P.S. Excitation and ionization processes in slow collisions of ground-state and excited hydrogen atoms with protons // Phys. Rev. A. -1992. - Vol. 46. - P. 5554.

14 Luedde H.J. and Dreizler R.M. Direct and capture processes in proton hydrogen scattering. II Total cross sections for bombarding energies of 1 to 50 keV// J. Phys. B. - 1982. - Vol. 15. - P. 2703.

15 Fritsch W. and Lin C.D. Coupled-state calculations for excitation, charge transfer, and ionization in 1-75-keV protonhydrogen-atom collisions // Phys. Rev. A. – 1983. – Vol. 27. – P. 3361.

16 Shakesshaft R. Coupled-state calculations of proton—hydrogen-atom scattering using a scaled hydrogenic basis set // Phys. Rev. A. - 1978. - Vol. 18. - P. 1930.

17 Fitchard E., Ford A.L. and Reading J.F. Hydrogen-atom excitation and ionization by proton impact in the 50- to 200-keV energy region // Phys. Rev. A. -1977. – Vol. 16. – P. 1325.

18 Freeman E.L. and Jones E.M. Atomic Collision Processes in Plasma Physics Experiments: I // UKAEA Rept. No. CLM-R137 (Culham Laboratory, Abingdon, England, 1974); and: Jones E.M. Atomic Collision Processes in Plasma Physics Experiments: II // UKAEA Rept. No. CLM-R175 (Culham Laboratory, Abingdon, England, 1977).

19 Celiberto R., Janev R.K., Laricchimta A., Capitelli M., Wadehra J.M. and Atems D.E. Cross section data for electronimpact inelastic processes of vibrationally excited molecules of hydrogen and its isotopes // At. Data Nucl. Data Tables. – 2001. – Vol. 77(2). – P. 161-214.

20 Saxena S., Gupta G.P. and Mathur C.K. Excitation of the hydrogen atom from its ground and metastable states by positron and proton impact at intermediate energies// J.Phys. B. -1984. -Vol. 17. -P. 3743.

21 Kondow T., Girnius R.J., Chong Y.P. and Fite W.L. Production of Lyman- α radiation in collisions of protons and hydrogen atoms // Phys. Rev. A. – 1974. – Vol. 10. – P. 1167.

22 Young R.A., Stebbings R.F. and McGowan J.W. Lyman- α Production and Polarization in He+ Collisions with H and H2 // Phys. Rev. – 1968. – Vol. 171. – P. 85; Stebbings R.F. et al. Lyman-Alpha Production in H⁺–H(1s) Collisions // Phys. Rev. – 1965. – Vol. 138. – P. 1312.

23 Schartner K.H., Detleffsen D. and Sommer B. Excitation of the 2p level in atomic hydrogen by He⁺and H⁺ impact between 70 and 700 keV // Phys. Lett. A. -1989. - Vol. 136. - P. 55.

24 Park J.T., Adlag J.E., George J.M. and Peacher J.L. Cross sections for excitation of atomic hydrogen to the n=2, 3, and 4 states by 15-200-keV protons // Phys. Rev. A. - 1976. - Vol. 14. - P. 608.

25 Reinhold C.O., Olson R.E. and Fritsch W. Excitation of atomic hydrogen by fully stripped ions // Phys. Rev. A. - 1990. - Vol. 41. - P. 4837.

26 Друкарев Т.Ф. Теория столкновений электронов с атомами. – М.: Физматгиз, 1963. – 37 с.

27 Бабиков В.В. Метод фазовых функций в квантовой механике. – М.: Наука, 1976. – 287 с.

28 Ramazanov T.S., Dzhumagulova K.N., Omarbakiyeva Y.A. Effective polarization interaction potential "charge-atom" for partially ly ionized dense plasma // Phys.Plasmas. – 2005. – Vol.12.- P.092702

29 Голант В.Е., Жилинский А.П., Сахаров С.А. Основы физики плазмы. – М.: Атомиздат, 1977. – С. 47-64.

References

1 H.R.J. Walters, J. Phys. B 21, 1893–1906, (1988). doi.org/10.1088/0953-4075/21/10/021

2 A.A. Kernoghan, D.J.R. Robinson, M.T. McAlinden, and H.R.J. Walters, J. Phys. B 29, 2089–2102, (1996).

3 S. Zhou, H. Li, W.E. Kaupilla, C.K. Kwan, and T.S. Stein, Phys. Rev. A 55, 361–368, (1997).

4 G.O. Jones, M. Charlton, J. Slevin, G. Laricchia, A. Koever, M.R. Poulsen, and S. Nic Chormaic, J. Phys. B 26, 483–488,

(1993).

5 L. Lugosi, B. Paripas, I.K. Gyemant, and K. Tokesi, Radiation Physics and Chemistry 68, 199–203, (2003).

6 R.E. Olson, Phys. Rev. A 24, 1726–1733, (1981).

7 D.R. Shultz, C.O. Reinhold, and R.E. Olson, Phys. Rev. A 40, 4947–4958, (1989).

8 K. Tokesi, and A. Koever, J. Phys. B 33, 3067-3077, (1996).

9 T.G. Morgan, J. Geddes and H.B. Gilbody, J. Phys. B 6, 2118, (1973).

10 Y.P. Chang and W.L. Fite, Phys. Rev. A 16, 933, (1977).

11 M. Kimura and W.R. Thorson, J. Phys. B: At. Mol. Phys. 16, 1471, (1983).

12 T.G. Winter, C.D. Lin, Phys. Rev. A 29, 567, (1984). doi.org/10.1103/PhysRevA.29.567

13 R.K. Janev and P.S. Krstic, Phys. Rev. A 46, 5554, (1992). doi.org/10.1103/PhysRevA.46.5554

14 H.J. Luedde and R.M. Dreizler, J.Phys. B 15, 2703, (1982).

15 W. Fritsch and C.D. Lin, Phys. Rev. A 27, 3361, (1977). doi.org/10.1103/PhysRevA.27.3361

16 R. Shakesshaft, Phys. Rev. A 18, 1930, (1978). doi.org/10.1103/PhysRevA.18.1930

17 E. Fitchard, A.L. Ford and J.F. Reading, Phys. Rev. A 16, 1325, (1977). doi.org/10.1103/PhysRevA.16.1325

18 E.L. Freeman and E.M. Jones, Atomic Collision Processes in Plasma Physics Experiments: I (UKAEA Rept. No. CLM-R137 (Culham Laboratory, Abingdon, England, 1974)); and: Jones E.M. Atomic Collision Processes in Plasma Physics

Experiments: II, (UKAEA Rept. No. CLM-R175 (Culham Laboratory, Abingdon, England, 1977)).
 19 R. Celiberto, R.K. Janev, A. Laricchimta, M. Capitelli, J.M. Wadehra and D.E. Atems, At. Data Nucl. Data Tables 77, 161,

(2001). doi: 10.1006/adnd.2000.0850

20 S. Saxena, G.P. Gupta and C.K. Mathur, J.Phys. B 17, 3743, (1984).

21 T. Kondow, R.J. Girnius, Y.P. Chong and W.L. Fite, Phys. Rev. A 10, 1167, (1974).

22 R.A. Young, R.F. Stebbings and J.W. McGowan, Phys. Rev. **171**, 85, (1968). doi.org/10.1103/PhysRev.171.85; R.F. Stebbings et al. Phys. Rev. **138**, 1312, (1965). doi.org/10.1103/PhysRev.138.A1312.

23 K.H. Schartner, D. Detleffsen and B. Sommer, Phys. Lett. A 136, 55, (1989). doi.org/10.1016/0375-9601(89)90676-2

24 J.T. Park, J.E. Adlag, J.M. George and J.L. Peacher, Phys. Rev. A 14, 608, (1976). doi.org/10.1103/PhysRevA.14.608

25 C.O. Reinhold, R.E. Olson and W. Fritsch, Phys. Rev. A 41, 4837, (1990).

26 T.F. Drukarev Teoriya stolknoveniy elektronov s atomami. (Moscow: Fizmatgiz, 1963), 37 p. (in Russ).

27 V.V. Babikov Metod fazovykh funktsiy v kvantovoy mekhanike (Moscow: Nauka, 1976), 287 p. (in Russ).

28 T.S. Ramazanov, K.N. Dzhumagulova, Y.A. Omarbakiyeva, Phys.Plasmas 12, 092702, (2005)

29 V.Ye. Golant, A.P. Zhilinskiy, S.A. Sakharov Osnovy fiziki plazmy (Moscow: Atomizdat, 1977), pp. 47-64. (in Russ).

МРНТИ 29.19.22

Батрышев Д.Г.^{1,3}, Ерланулы Е.^{1,3}, Рамазанов Т.С.², Габдуллин М.Т.^{3*}, Абдыкадыров Б.К.³, Амирбекова Г.С.¹, Дайнеко Р.А.³

¹Лаборатория инженерного профиля, КазНУ им. аль-Фараби, Казахстан, Алматы, ²Научно-исследовательский институт экспериментальной и теоретической физики, КазНУ им. аль-Фараби, Казахстан, Алматы ³Национальная нанотехнологическая лаборатбория открытого типа, КазНУ им. аль-Фараби,

Казахстан, Алматы, *e-mail: gabdullin@physics.kz

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ И ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ ГРАФАНА ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

Данная работа посвящена изучению структурных и электронных свойств графана «из первых принципов» методом функционала электронной плотности и приближения Хартри-Фока. На основе данного метода были проведены квантовохимические расчеты минимума энергии и ширины запрещенной зоны графана типов boat-1 и boat-2. Было обнаружено, что после оптимизации структуры графана типов boat-1 и boat-2, значения энергия связи атомов превосходят по модулю известные литературные данные, что говорит о нахождении более стабильной структуры. Структурные параметры графана типа boat-2 были значительно изменены, нежели типа boat-1, возможно из-за того, что последнее обладает более стабильной структурой. Хотя расчеты электронных свойств показывает, что значения ширины запрещенной зоны для обоих типов графана остаются практически неизменными.

Ключевые слова: Графан, структурные свойства, электронные свойства, функционал электронной плотности.

Batryshev D.G.^{1,3}, Yerlanuly Ye.^{1,3}, Ramazanov T.S.², Gabdullin M.T.^{3*}, Abdykadyrov B.K.³, Amirbekova G.S.¹, Daineko R.A.³ ¹Laboratoty of engineering profile, al-Farabi Kazakh National university, Kazakhstan, Almaty, ²Institute of Experimental and theoretical physics, al-Farabi Kazakh National university, Kazakhstan, Almaty ³National Nanotechnology Open Laboratory, al-Farabi Kazakh National university, Kazakhstan, Almaty, *e-mail: gabdullin@physics.kz

First principle calculation of the structural and electronic properties of graphane

In this work, a first principle calculation of structural and electronic properties of graphane by density functional theory (DFT) and Hartree-Fock (HF) approximation is considered. On the basis of this hybrid method, quantum-chemical calculations of the minimum energy and bandgap widths of boat-1 and boat-2 types of graphane were carried out. It was found that after optimization of graphane structure (boat-1 and boat-2) the absolute values of the cohesive energy of the atoms exceed the known literary data, which indicates the finding of a more stable structure. After optimization, the structural parameters of graphane boat-2 have been significantly changed, than the boat-1 type, perhaps because the boat-1 type has a more stable structure. Although, the calculations of electronic properties show that the values of the band gap width for both types of graphane were almost unchanged and they still are wide-gap semiconductors that can be used in electronics to create various sensors and transistors.

Key words: Graphane, structural properties, electronic properties, density functional theory

Батрышев Д.Ғ.^{1,3}, Ерланұлы Е.^{1,3}, Рамазанов Т.С.², Габдуллин М.Т.^{3*}, Абдықадыров Б.К.³, Әмірбекова Г.С.¹, Дайнеко Р.А.³

¹Инженерлік профилді зертхана, әл-Фараби атындағы ҚазҰУ, Қазақстан, Алматы, ²Эксперименттік және теориялық физика ғылыми зерттеу институты, әл-Фараби атындағы ҚазҰУ, Қазақстан, Алматы, ³Ашық түрдегі ұлттық нанотехнологиялық зертхана, әл-Фараби атындағы ҚазҰУ, Қазақстан, Алматы, *e-mail: gabdullin@physics.kz

Графанның құрылымдық және электрондық қасиеттерін бірінші принциптер негізінде зерттеу

Бұл жұмыс «бірінші принциптер» негізінде электронды тығыздық функциясы және Хартри-Фок жуықталуы әдісімен графанның құрылымдық және электрондық қасиеттерін зерттеуге арналған. Осы әдіс негізінде boat-1 және boat-2 графана типтерінің энергетикалық минимумы және тыйым салынған аймақ ені кванттық-химиялық есептеулері жүргізілді. Графан құрылымының boat-1 және boat-2 типтерінің оптимизациялаудан кейін атомдардың байланыс энергиясының мәндері белгілі әдеби деректерден асып түсетіні анықталды, бұл графанның тұрақты құрылымы табылғанын көрсетеді. Boat-2 типті графанның құрылымдық параметрлері boat-1 типіне қарағанда айтарлықтай өзгерді, бұл оның тұрақты құрылымы болуы мүмкін. Алайда, электрондық қасиеттерін есептеулерінде графанның екі типінде тыйым салынған аймақ енінде айырмашылық жоқ екендігін көрсетеді.

Түйін сөздер: Графан, құрылымдық қасиеттер, электрондық қасиеттер, электрондық тығыздықтың функционалы.

Введение

Графан – двумерный материал, в котором один атом углерода связан с одним атомом водорода и тремя атомами углерода. Существование графана впервые было предсказано 2003 году в теоретической работе [1], а экспериментально был получен в 2009 году воздействием водородной плазмы с графеном [2]. После открытия нового материала, началось активное исследование свойств графана и пути его практического применения. Ученые предлагаю использовать графан в медицине [3], в электронике [2,4,5] а также в энергетике [6-7]. Для использования графана в перечисленных отраслях, требуется обширное понимание их электронных и структурных свойств. Именно для этих целей компьютерное моделирование и теоретические расчеты являются подходящими методами исследования характеристик наноматериалов, которые имеют немаловажное значение в процессе изучения свойств наноструктур, в частности графана [8-11]. Расчеты структурных и электронных свойств осуществляются «из первых принципов», как в рамках приближения Хартри-Фока (HF), так и теории функционала электронной плотности (DFT), а также гибридного метода (DFT/HF). В основе используемых методов лежит представление одноэлектронных волновых функций, которые в свою очередь выражаются через локальные базисные функции на основе функций гауссового типа.

Расчет и обсуждение

В данной работе были рассмотрены две разные структуры графана boat-1 (UUDDUU) и boat-2 (UUUUDD). В данном контексте значения U и D соответствуют Up и Down, т.е. в обеих конфигурациях относительно плоскости графена 4 атома водорода связаны сверху, а две снизу. Для построения структур гидрогенизированного графена boat-1 (UUDDUU) и boat-2 (UUUUDD) были использованы орторомбические кристаллические решетки Рттп (59) и Рbст (57), с параметрами решетки a=2.529, b=4.309, c=15.0(Å) и a=15, b=4.585, c=4.328(Å) соответственно [13]. Структура была 3D визуализирована в программе VESTA, с помощью которой были определены расстояния между атомами C-H (1,1059Å), С-С(1,5363Å; 1,5702Å) и С-Н (1,1033Å), С-С (1,5487 Å; 1,5728Å; 1,5417 Å) для каждой структуры. 3D визуализация структур графана представлены на рисунке 1. Все основные вводные параметры структур boat-1 (UUDDUU) и boat-2 (UUUUDD) представлены в таблице 1.



Рисунок 1 – Структура графана конфигурации boat-1 (UUDDUU) и boat-2 (UUUUDD)

Таблица 1 – Структурная информация boat-1 (UUDDUU) и boat-2 (UUUUDD) графана

Структура графана	Пространственная группа (SG) и параметры решетки (LC)	Координаты для атомов Н и С	Длина связи С-Н (L _{CH}) и длина связи С-С (L _{CC})
boat-1	Pmmn (59)	H:(0.5000, 0.2562, 0.5922)	C-H (1,1059Å),
(UUDDUU)	a=2.529, b=4.309, c=15.0	C:(0.5000, 0.1822, 0.5216)	C-C(1,5363Å; 1,5702Å)
boat-2	Pbcm (57)	H:(0.3987, 0.4932, 0.5036)	C-H (1,1033Å),
(UUUUDD)	a=15, b=4.585, c=4.328	C:(0.4622, 0.5939, 0.4317)	C-C (1,5487 Å; 1,5728Å; 1,5417 Å)

Для изучения структурных и электронных свойств представленных структур графана был использован гибридный метод. Из литературных данных [12-13] известно, что использование гибридного функционала дает качественное описание электронных и структурных свойств периодической системы (энергия оптимизации, длина химической связи, ширина запрещённой зоны и т.д.) соответствующие результатам экспериментальных измерений. Квантово-механические расчеты из первых принципов (abinitio) выполнены в рамках функционалов метода локальной электронной плотности и обобщенного градиента (Generalized Gradient Approximation) с помощью гибридного функционала Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE-GGA) [14].

Величина энергии обрезания в расчетах равнялась 400 эВ, такую же энергию обрезания использовали при оптимизации. При расчете зона Брюллюэна была разбита с помощью метода Монкроста-Пака [15] на сетки размером $13 \times 21 \times 1$. Для всех исследованных структур оптимизация атомной структуры проводилась до тех пор, пока межатомные силы не становились меньше 0,01 eV/Å.

Для нахождения наиболее выгодной атомной структуры, позиции атомов в ячейке и структурные размеры ячейки оптимизировались до достижения минимума структурной энергии (lowest-energy (DFT) ground-states). После процесса оптимизации, параметры решетки boat-1 практически остались неизменными, но в коор-
динатах атомов и длинах связи между атомами С-Н и С-С были заметны незначительные изменения, в структуре boat-2 изменения наблюдается во всех параметрах, которые представлены в таблице 2.

При вычислении полной энергий после оптимизации структур boat-1 и boat-2, было выявлено, что действительно структура boat-1 более стабильна, нежели boat-2. Энергия системы boat-1 равна 50,854 эВ, где на каждый атом приходится 6,35675 эВ. Энергия системы boat-2 равна 101,338 эВ, где на каждый атом приходится энергия 6,333625 эВ. Полученные значения энергии связи выше, нежели в литературе [12], что свидетельствует об более стабильной структуре графана, в частности для типа boat-2.

Таблица 2 – Структурная информация boat-1 (UUDDUU) и boat-2 (UUUUDD) графана после проведения оптимизации структуры

Структура графана	Пространственная группа (SG), параметры решетки (LC)	Координаты для атомов Н и С	Длина связи С-Н (L _{CH}) и длина связи С-С (L _{CC})
boat-1	Pmmn (59)	H:(0.5000, 0.25617, 0.59219)	C-H (1,1057Å),
(UUDDUU)	a=2.529, b=4.309, c=15.0	C:(0.5000, 0.18215, 0.52161)	C-C(1,5366Å; 1,5798Å)
boat-2	Pbcm (57)	H:(0.3987, 0.4932, 0.5036) C:(0.4622, 0.5939, 0.4317)	C-H (1,1033Å),
(UUUUDD)	a=15.15, b=4.63, c=4.328		C-C (1,5487 Å; 1,5728Å; 1,5417 Å)

Далее также были исследованы электронные свойства этих структур, в частности ширина запрещенной зоны, которое имеет важное значение для будущего их применения в электронике при изготовлении полупроводниковых элементов. Расчитанные электронные структуры для двух конфигураций представлены на рисунках 2 и 3. Полученные значения ширины запрещенной зоны 3,377эВ (boat-1) и 3,454 эВ (boat-2) хорошо согласуются с результатами других авторов [13]. И можно утверждать, что графан со структурой boat-1 и boat-2 являются широкозонными полупроводниками.



Рисунок 2 – Электронная структура графана boat-1



Рисунок 3 – Электронная структура графана boat-2

Вывод

Таким образом, в данной работе были проведены квантово-механические расчеты графана из первых принципов (abinitio), выполненные в рамках функционалов метода локальной электронной плотности и обобщенного градиента (Generalized Gradient Approximation) с помощью гибридного функционала Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE- GGA). Результаты расчетов хорошо согласуются с известными литературными данными и показывают, что графан типов boat-1 и boat-2 являются широкозонными полупроводниками, которые могут быть применены в электронике для создания различных датчиков и транзисторов. Было обнаружено, что после оптимизации структуры графана типов boat-1 и boat-2, значения энергия связи атомов превосходят по модулю известные литературные данные, что говорит о нахождении более стабильной структуры.

Благодарность

Данная работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Республики Казахстан в рамках гранта 0263/ПЦФ4.

Литература

1 Sluiter M.H.F. and Kawazoe Y. Cluster expansion method for adsorption: Application to hydrogen chemisorption on graphene // Phys. Rev. B. – 2003. – Vol. 68. – P.085410.

2 Elias D.C., Nair R.R., Mohiuddin T.M.G., Morozov S.V., Blake P., Halsall M.P. et. al. Control of Graphene's Properties by Reversible Hydrogenation: Evidence for Graphane // Science. – 2009. – Vol. 323, iss.5914. – P. 610-613.

3 Tan S.M., Sofer Z., Pumera M. Biomarkers Detection on Hydrogenated Graphene Surfaces: Towards Applications of Graphane in Biosensing // Electroanalysis. – 2013. – Vol. 25, №3. – P. 703-705.

4 Seah T.H., Poh H.L., Chua C.K., Sofer Z., Pumera M. Towards Graphane Applications in Security: The Electrochemical Detection of Trinitrotoluene in Seawater on Hydrogenated Graphene // Electroanalysis. – 2014. – Vol. 26, №1. – P. 62-68.

5 Gharekhanlou B., Tousaki S.B., Khorasani S. Bipolar transistor based on graphane. // Phys. Conf. Ser. – 2010. – Vol. 248. – P.012061.

6 Savchenko A: Transforming graphene // Sci. – 2009. – Vol. 323. – P.589.

7 Srinivas G., Zhu Y.W., Piner R., Skipper N., Ellerby M., Ruoff R. Synthesis of graphene-like nanosheets and their hydrogen adsorption capacity // Carbon. –2010.–Vol. 48, №. 3.–P. 630.

8 Ilyin A.M., Guseinov N.R., Nemkaeva R.R., Tsyganov I.A., Theoretical and experimental study of graphene-like materials // Nanomaterials and Energy. – 2012. – Vol.1. – P.111-114.

9 Zhou Q.X., Ju W.W., Yong Y.L., Su X.Y., Li X.H., Fu. Z.B., Wang C.Y., Effect of H-vacancy defect on the adsorption of CO and NO on graphane: A DFT study // Applied surface science. – 2017. – Vol.420. –P. 720-725.

10 Sofo J.O., Chaudhari A.S., Barber G.D., Graphane: A two-dimensional hydrocarbon // Phys. Rev. B – 2007. – Vol.75, №15 – P. 153401.

11 Rosas J.J.H., Gutierrez R.E.R., Escobedo-Morales A., Anota E.C., First principles calculations of the electronic and chemical properties of graphene, graphane, and graphene oxide // Journal of Molecular Modeling. – 2011. – Vol.17, №5. – P. 1133-1139.

12 He C., Sun L.Z., Zhang C.X., Jiao N., Zhang K.W., Zong J. Structure, stability and electronic properties of tricycle type graphene // Phys Status Solidi (RRL). Rapid Research Letters. – 2012. – Vol. 6. – P.427.

13 Zhou C., Chen S., Lou J., Wang J., Yang Q., LiuCh., Huang D. andZhu T., Graphene's cousin: the present and future of graphane // Nano scale Research Letters. -2014.-Vol. 9. -P. 26.

14 Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple // Phys. Rev. Lett. – 1996 – Vol.77. – P. 3865-3868.

15 Monkhorst H.J. and Pack J.D. Special points for Brillouin-zone integrations // Physical Review B. - 1976. - Vol.13. - P. 5188.

References

1 M.H.F. Sluiter and Y. Kawazoe, Phys. Rev. B 68, 085410, (2003). doi.org/10.1103/PhysRevB.68.085410.

2 D.C. Elias, R.R. Nair, T.M.G. Mohiuddin, S.V. Morozov, P. Blake, M.P. Halsall et. al, Science 323, 610, (2009). doi: 10.1126/science.1167130.

3 S.M. Tan, Z. Sofer and M. Pumera, Electroanalysis 25, 3, 703-705, (2013).

4 T.H. Seah, H.L. Poh, C.K. Chua, Z. Sofer, and M. Pumera, Electroanalysis 26, 1, 62-68, (2014).

5 B. Gharekhanlou, S.B. Tousaki, and S. Khorasani, Phys. Conf. Ser 248, 012061, (2010).

6 A. Savchenko, Sci 323, 589, (2009).

7 G. Srinivas, Y.W. Zhu, R. Piner, N. Skipper, M. Ellerby, and R. Ruoff, Carbon 48, 3, 630, (2010).

8 A.M. Ilyin, N.R. Guseinov, R.R. Nemkaeva, and I.A. Tsyganov, Nanomaterials and Energy 1, 111-114, (2012).

9 Q.X. Zhou, W.W. Ju, Y.L. Yong, X.Y. Su, X.H. Li, Z.B. Fu, and C.Y. Wang, Applied surface science 420, 720-725, (2017).

10 J.O. Sofo and A.S. Chaudhari, G.D. Barber, Phys. Rev. B 75, 15, 153401, (2007).

11 J.J.H. Rosas, R.E.R. Gutierrez, A. Escobedo-Morales, and E.C. Anota, J. of Molecular Modeling 17, 5, 1133-1139, (2011).

12 C. He, L.Z. Sun, C.X. Zhang, N. Jiao, K.W. Zhang, and J. Zong, Phys Status Solidi (RRL) -Rapid Research Letters 6, 427, (2012).

13 C. Zhou, S. Chen, J. Lou, J. Wang, Q. Yang, Ch. Liu, D. Huang and T. Zhu, Nanoscale Research Letters 9, 26, (2014).

14 J.P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. 77, 3865-3868, (1996).

15 H.J. Monkhorst and J.D. Pack, Phys. Rev. B 13, 5188, (1976).

МРНТИ 29.27.01; 29.27.31

Еримбетова Л.Т.

Казахский Национальный университет имени аль-Фараби, Казахстан, Алматы, e-mail: lyazzat.yerimbet.26@gmail.com

МЕТОД ИНТЕГРАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ДЛЯ ПЫЛЕВЫХ ЧАСТИЦ КОНЕЧНЫХ РАЗМЕРОВ

В данной работе используется предложенная ранее псевдопотенциальная модель взаимодействия частиц пылевой плазмы, которая корректно учитывает конечность размеров пылинок в рамках классической электродинамики плазмы в приближении хаотических фаз. Построенный таким образом потенциал значительно отличается от широко применяемого потенциала Юкавы (Дебая-Хюккеля) при достаточно больших значениях параметра экранировки, что объясняется использованием разных граничных условий у поверхности пылинок. Предложенная псевдопотенциальная модель применяется для определения радиальных функций распределения и статических структурных факторов пылевых частиц методом интегральных уравнений. В частности, используется уравнение Орнштейна-Цернике в гиперцепном приближении с мостиковыми поправками для точечных частиц. Так как в данном исследовании размеры пылевых частиц предполагаются конечными, то вычисление также проводится в рамках комбинированного метода интегральных уравнений, который основан на том, что вначале вычисляются корреляционные функции для системы твердых шаров в уравнении Перкуса-Йевика, а затем делается переход к модели твердых заряженных шаров в базовом гиперцепном приближении. Результаты показывают, что при больших плотностях упаковки радиальные функции распределения и статические структурные факторы демонстрируют более значительные пики по сравнению с простым методом Орнштейна-Цернике в гиперцепном приближении, что свидетельствует об образовании ближнего и дальнего порядка в расположении пылинок при больших значениях их параметра связи.

Ключевые слова: Пылевая плазма, эффекты экранировки, модель взаимодействия частиц, радиальные функции распределения, статические структурные факторы, интегральное уравнение Орнштейна-Цернике, уравнение Перкуса-Йевика.

Yerimbetova L.T.

al-Farabi Kazakh National University, Kazakhstan, Almaty, e-mail: lyazzat.yerimbet.26@gmail.com

Method of integral equations for dust particles of finite size

In this paper we make use of the earlier proposed pseudopotential model of interaction of dusty plasma particles, which correctly takes into account the finite size of the dust particles in the framework of classical plasma electrodynamics in the random-phase approximation. The potential thus constructed differs significantly from the widely used Yukawa (Debye-Hückel) potential at sufficiently large values of the screening parameter, which is explained by the engagement of different boundary conditions at the surface of dust particles. The proposed pseudopotential model is applied to determine the radial distribution functions and the static structural factors of dust particles by the method of integral equations. In particular, the Ornstein-Zernike relation in the hypernetted-chain approximation with the bridge functions for the point-like particles is numerically solved. Since the dimensions of the dust particles are assumed to be finite, the calculations are also carried out within the framework of the combined method of integral equations, which is based on the determination of the correlation functions for the system of hard spheres within the Percus-Yevick equation with further transition to a model of solid charged balls

studied within the modified hypernetted-chain approximation. The results show that at high packing fractions, the radial distribution functions and the static structural factors exhibit more significant peaks in comparison with the simple Ornstein-Zernike relation in the hypernetted-chain approximation, which indicates the formation of short-range and long-range orders in the arrangement of dust particles at rather large values of their coupling.

Key words: Dusty plasma, screening effects, interaction model, radial distribution function, the static structural factors, the Ornstein-Zernike integral equation, the Percus-Yevick equation.

Ерімбетова Л.Т.

Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Қазақстан, Алматы қ., e-mail: lyazzat.yerimbet.26@gmail.com

Шекті өлшемді тозаң бөлшектері үшін интегралдық теңдеулер әдісі

Осы жұмыста классикалық электродинамика аясындағы ретсіз фаза жақындауында тозаңдардың шекті өлшемділігін ұисынды есепке алатын, ертеректе ұсынылған тозаңды плазма бөлшектерінің псевдопотенциалдық үлгіде әсерлесуі қолданылады. Осылайша құрылған потенциал, экрандалу параметрінің жеткілікті үлкен шамасында кеңінен қолданылатын Юкава (Дебай-Хюккель) потенциалынан айтарлықтай айырмашылығы бар, ол тозаңшалардың беткі қабатыны төңірегінде әртүрлі шекаралық шарттардың қолданылуымен түсіндіріледі. Ұсынылып отырған псевдопотенциалдық үлгі интегральдық теңдеулер әдісімен тозаң бөлшектерінің радиальды функцияларының таралуы мен статикалық құрылымдық факторын анықтау үшін қолданылады. Жекелеп айтқанда, нүктелік өлшемді бөлшектер үшін көпірлік түзетулерімен гиперцепті жуықтаудағы Орнштейн-Церник теңдеуі қолданылады. Осы зерттеуде тозаң бөлшектерінің өлшемі шекті деп ұйғарылғандықтан, есептеу тағы интеграл теңдеулерінің комбинациялық үлгісі аясында жүргізіледі, ол мынаған негізделген, алдымен қатты шарлар жүйесі үшін Перкус-Йевик теңдеуіндегі корреляциялық функциялар есептелінеді, содан соң өзгертілген гиперцептік жуықтаудағы зарядталған қатты шарлар үлгісіне өту жасалынады. Нәтижелер үлкен тығыздықтарда радиальды функция таралуы және статикалық құрылымдық факторлар, қарапайым гиперцепті жуықтаудағы Орнштейн-Церник үлгісімен салыстырғанда, айтарлықтай шыңдар көрсетіп тұрғанын көрсетеді, ал ол байланыс параметрінің үлкен шамаларында тозаңдардың орналасуында алыс және жақын реттіктің пайда болуын айғақтайды.

Түйін сөздер: Тозаңды өткізгіш бөлшектері бар плазма, экранировка эффектілері, бөлшектердің әсерлесу моделі, радиалды таралу функциясы, статикалық құрылымдық фактор, Орнштейна-Цернике интегралдық теңдеуі, Перкус-Йевик теңдеуі.

Введение

В последние десятилетия активно продолжаются исследования пылевой плазмы, то есть обычной плазмы, в которой присутствуют частицы микронных размеров, называемые пылинками [1,2]. Известно, что пылинки в плазме приобретают такой, в основном отрицательный, электрический заряд [3,4], что энергия их взаимодействия становится много большей в сравнении с кинетической энергией их хаотического движения [5,6]. При этом пылинки в своем расположении по отношению друг к другу образуют структуру, напоминающую кристаллическую решетку и называемую плазменным кристаллом [7,8].

Пылевая плазма часто встречается как в природных, так и в лабораторных условиях [9,10]. Например, она изучается в астрофизических приложениях и экспериментах в космосе [11,12], рождается при контакте плазмы со стенками установок управляемого термоядерного синтеза [13,14], используется в медицине для лечения рака [15,16] и т.д. Пылевая плазма сохраняет и свое фундаментальное значение, так как поведение частиц легко фиксируется в эксперименте с помощью видеокамеры высокого разрешения [17,18], что позволяет непосредственно тестировать теоретические методы, разработанные для открытых и неидеальных многочастичных систем [19,20].

В современной литературе по физике пылевой плазмы главным образом применяются эвристические подходы для исследования термодинамических свойств пылевой компоненты, которые в той или иной мере основаны на использовании потенциала Юкавы (Дебая-Хюккеля) [21,22] с постоянным зарядом частиц. До конца такое приближение нельзя считать удовлетворительным, так как при выводе потенциала Юкавы существенно используется тот факт, что частицы должны быть точечными, но тогда они не смогут приобретать электрический заряд. В этом смысле логически последовательное

исследованное необходимо проводить по предложенной в данном проекте методике, которая базируется на определении потенциалов взаимодействия, прямом вычислении заряда пылинок в рамках метода ограниченного орбитального движения, определении радиальных функций распределения и соответствующих им статических структурных факторов методами интегральных уравнений, Монте-Карло и молекулярной динамики, и, наконец, расчете на их основе термодинамических характеристик пылевой компоненты. Подобное рассмотрение позволяет точно рассчитывать спектр пыле-акустических волн, в котором учитывается процесс перезарядки самих пылевых частиц, характерное время которого должно оставаться много меньшим обратной частоты легмюровских колебаний пылинок.

В данной работе используется потенциал взаимодействия, полученный в [23] в рамках классической электродинамики плазмы и учитывающий конечность размеров пылевых частиц. Строго говоря, с физической точки зрения практически очевидно, что все корреляционные функции системы определяются потенциальной энергией взаимодействия ее компонентов. Одним из наиболее эффективных методов их определения является метод интегральных уравнений, позволяющий изучать радиальные функции распределения и статические структурные факторы в широкой области изменения параметров системы.

В настоящем исследовании проведено сравнение двух методов с целью установления влияния конечности размеров пылинок на их корреляционные функции. В первом подходе частицы считаются точечными, так что взаимодействие между ними реализуется потенциалом Юкавы, а вычисление радиальных функций распределения и статических структурных факторов проводится в рамках уравнения Орнштейна-Цернике в гиперцепном приближении с мостиковыми поправками [24,25]. Во втором методе частицы рассматриваются как твердые заряженные шары, при этом вначале вычисляются корреляционные функции подсистемы твердых шаров в рамках уравнения Перкуса-Йевика [26], а затем решается модифицированное уравнение Орнштейна-Цернике в гиперцепном приближении [27].

Параметры плазмы

Рассмотрим однокомпонентную пылевую плазму с концентрацией пылинок n и температурой T. Сами пылевые частицы будем считать сферическими с радиусом R и электрическим зарядом Ze, где e – заряд электрона, а Z – зарядовое число пылинок.

Состояние пылевой компоненты плазмы характеризуется параметром связи

$$\Gamma = \frac{Z^2 e^2}{a k_B T},\tag{1}$$

где $a = (3/4\pi n)^{1/3}$ – среднее расстояние между пылевыми частицами, k_B – постоянная Больцмана, а также параметром экранирования

$$\kappa = ak_D, \tag{2}$$

в котором k_D – волновое число, обратное радиусу Дебая r_D экранирования поля электронами и ионами буферной плазмы.

Для учета конечности размера пылевых частиц введем параметр, который определяет долю объема системы, занятой пылинками, и называется плотностью упаковки

$$\eta = \frac{4}{3}\pi nR^3.$$
 (3)

Введенные параметры полностью определяют состояние пылевой компоненты плазмы с частицами конечных размеров.

Потенциал взаимодействия пылевых частиц

В современной литературе по физике пылевой плазмы широко используется потенциал Юкавы взаимодействия пылевых частиц, имеющий вид:

$$\varphi(r) = \frac{Z^2 e^2}{r} \exp\left(-k_D r\right). \tag{4}$$

Ранее в работе [23] был предложен следующий потенциал взаимодействия пылинок, учитывающий конечность их размеров

$$\varphi(r) = \frac{Z^2 e^2}{r + 2R} - \frac{Z^2 e^2}{r} \left[1 - \exp(-k_D r) - k_D R B(r) \right],$$
(5)

Вестник. Серия физическая. №3 (62). 2017

где

$$B(r) = \exp(k_D(2R+r)) \operatorname{Ei}(k_D(2R+r)) - \exp(k_D(2R-r)) \operatorname{Ei}(2k_DR) + \exp(-k_D(2R+r)) \left[\operatorname{Ei}(2k_DR) - \operatorname{Ei}(-k_D(2R+r))\right]$$
(6)

с экспоненциальной интегральной функцией

$$\operatorname{Ei}(x) = \int_{x}^{\infty} \frac{\exp(-t)}{t} dt \,. \tag{7}$$

Следует отметить, что в приведенных выражениях (5) и (6) расстояние между пылевыми частицами отсчитывается от их поверхностей, что необходимо учитывать при всех дальнейших расчетах методом интегральных уравнений.

На рисунке 1 проведено сравнение потенциалов (4) и (5) для параметров плазмы $\Gamma = 100$, $\kappa = 1$ и $\eta = 0.1$. Из рисунка видно, что потенциал (5) лежит выше потенциала (4), так как экранировка начинает действовать только от поверхности частиц.



Рисунок 1 – Приведенная потенциальная энергия взаимодействия пылевых частиц в буферной плазме при Γ = 100, κ = 1 и η = 0,1. Штриховая линия: формула (4); сплошная линия: формула (5)

Корреляционные функции пылинок

Для определения радиальных функций распределения широко используется метод интегральных уравнений. Дело в том, что с точки зрения статистической физики многочастичные функции распределения известны точно и выражаются распределением Гиббса. Однако они несут в себе много лишней информации, которая не нужна на практике. С точки зрения вычисления термодинамических характеристик среды достаточно знать всего лишь парную корреляционную функцию или соответствующую радиальную функцию распределения.

Из статистической физики равновесных систем многих частиц известно, что прямая корреляционная функция $C(\mathbf{r})$ и парная корреляционная функция $h(\mathbf{r})$ связаны соотношением, называемым уравнением Орнштейна-Цернике, которое для однокомпонентной системы имеет вид

$$h(\mathbf{r}) = C(\mathbf{r}) + n \int C(\mathbf{r} - \mathbf{r}')h(\mathbf{r}')d\mathbf{r}', \qquad (8)$$

где

$$h(\mathbf{r}) = g(\mathbf{r}) - 1, \tag{9}$$

а $g(\mathbf{r})$ – парная корреляционная функция и n – концентрация частиц.

Уравнения (7) и (8) являются фактически определениями, а поэтому точны в математическом и физическом смыслах, но их недостаточно для определения трех неизвестных функций.

Существует еще одно соотношение, которое является точным и выражает радиальную функцию распределения через так называемую мостиковую поправку $B(\mathbf{r})$ в виде

$$g(\mathbf{r}) = \exp\left(-\frac{\varphi(r)}{k_B T} + h(\mathbf{r}) - C(\mathbf{r}) + B(\mathbf{r})\right).$$
(10)

Уравнение (10) не дает нам ничего нового с точки зрения возможности нахождения радиальных функций распределения, так как оно одновременно вводит еще одно неизвестное переменное $B(\mathbf{r})$. Поэтому рассмотрим несколько практических способов, предложенных в литературе.

Наиболее простым является так называемое гиперцепное приближение, которое состоит в том, что мостиковая поправка просто обнуляется, то есть полагается

$$B(\mathbf{r}) = 0. \tag{11}$$

В этом случае система уравнений (8)-(10) может быть решена численно путем использования итерационного алгоритма. Сравнение с результатами численного моделирования показало, что гиперцепное приближение очень хорошо работает для не слишком сильно связанных систем.

С уменьшением расстояний между частицами отклонения гиперцепного приближения от результатов моделирования методом Монте-Карло и молекулярной динамики достигает значительных величин, что стимулировало дальнейшие исследования в этом направлении. Было отмечено, что при очень больших параметрах связи системы радиальные функции становятся похожими на те, которые наблюдаются для системы так называемых твердых шаров, которые обычно анализируются в приближении Перкуса-Йевика [26]

$$C(\mathbf{r}) = g(\mathbf{r}) \left[1 - \exp\left(\frac{\varphi(r)}{k_B T}\right) \right].$$
(12)

Это приводит к тому, что радиальная функция распределения обращается в нуль там, где потенциал твердых сфер обращается в бесконечность, а это в свою очередь позволяет решить полученную систему уравнений и полностью определить все неизвестные функции для твердых сфер. Обнуление радиальной функции распределения на расстояниях, меньше диаметра взаимодействующих частиц, является естественным физическим требованием модели твердых сфер, которые не могут проникать друг в друга. Для этого достаточно вспомнить физический смысл радиальной функции распределения, которая представляет собой плотность вероятности обнаружения частиц на некотором расстоянии друг от друга. Следует особо подчеркнуть, что результаты компьютерного моделирования системы твердых сфер методами Монте-Карло и молекулярной динамики полностью подтвердили справедливость уравнения Перкуса-Йевика.

Этот успех для систем твердых сфер позволил продвинуться дальше, выдвинув целый ряд возможных приближенных решений для произвольного потенциала взаимодействия. Основная их идея состоит в том, чтобы использовать систему твердых сфер в качестве базовой и представить реальный потенциал взаимодействия как сумму двух частей, одна из которых составляет потенциал твердых сфер, а другая жестко определена потенциалом взаимодействия самой системы. Все эти методы так или иначе используют тот факт, что мостиковые вклады слабо зависят от потенциала взаимодействия и поэтому могут быть фактически взяты из решения уравнения Перкуса-Йевика для твердых сфер. Так появилось простейшее, так называемое базовое гиперцепное приближение [27].

В дальнейшем Ладо предложил усложнить схему, так как было не вполне ясен выбор размера частиц. Он предложил минимизировать свободную энергию системы при вариации радиальной функции распределения. Такая схема получила название модифицированного гиперцепного приближения [28].

Розенфельд и Ашкрофт [29] пошли еще дальше и предложили минимизировать свободную энергию производя вариацию всех параметров системы/, что позволило не контролировать выполнение дополнительных условий, которые появлялись в базовом гиперцепном приближении. Этот метод в литературе получил название вариационно-модифицированного гиперцепного приближения.

В нашей системе пылевые частицы сами по себе являются заряженными твердыми сферами, поэтому варьирование их размера не представляется возможным. В этой связи кажется разумным использование базового гиперцепного приближения, а также подхода, основанного на решении обычного уравнения Орнштейна-Цернике в гиперцепном приближении с известными мостиковыми вкладами.

Сравнение радиальных функций распределения для предложенного ранее потенциала взаимодействия и потенциала Юкавы представлено на рисунках 2-7. При этом следует отметить, что отдельно не приходится требовать обнуление радиальной функции распределения там, где расстояние между частицами фактически уменьшается до значения, меньшего диаметра взаимодействия пылевых частиц. Этот результат гарантируется использованием самого метода, в который органично входит использование решения уравнения Перкуса-Йевика для потенциала твердых сфер.



Рисунок 2 – Радиальные функции распределения, рассчитанные разными методами при Γ = 10, k = 1.5 и η = 0.3. Штриховая линия: гиперцепное приближение с потенциалом (4); сплошная линия: базовое гиперцепное приближение с потенциалом (5)



Рисунок 4 – Радиальные функции распределения, рассчитанные разными методами при Γ = 60, k = 1.5 и η = 0.3. Штриховая линия: гиперцепное приближение с потенциалом (4); сплошная линия: базовое гиперцепное приближение с потенциалом (5)

Анализ полученных графических данных позволяет сделать следующие выводы. При очень малых плотностях упаковки и малых параметрах связи оба использованных метода, то есть уравнение Орнштейна-Цернике в гиперцепном приближении с потенциалом Юкавы (4) и базовое гиперцепноеприближение с потенциалом (5), дают практически совпадающие результаты. При этом величина первого пика на радиальной функции распределения в базовом гиперцепном



Рисунок 3 – Радиальные функции распределения, рассчитанные разными методами при Γ = 10, k = 1.5 и η = 10⁻⁶. Штриховая линия: гиперцепное приближение с потенциалом (4); сплошная линия: базовое гиперцепное приближение с потенциалом (5)



Рисунок 5 – Радиальные функции распределения, рассчитанные разными методами при Γ = 60, k = 1.5 и η = 10⁻⁶. Штриховая линия: гиперцепное приближение с потенциалом (4); сплошная линия: базовое гиперцепное приближение с потенциалом (5)

приближении резко возрастает с увеличением плотности упаковки, а сам он располагается значительно правее такого же пика в гиперцепном приближении, что свидетельствует о необходимости корректного и последовательного учета размера пылевых частиц. Следует отметить, что в пылевой плазме, встречающейся в реальных экспериментальных установках, плотность упаковки обычно не является большой и можно применять обычное гиперцепное приближение. Однако это может оказаться несправедливым для так называемых коллоидных суспензий, к которым построенная теоретическая модель также применима. Аналогичное сравнение выполнено для статических структурных факторов и представлено на рисунках 8-13.



Рисунок 6 – Радиальные функции распределения, рассчитанные разными методами при Γ = 120, k = 1.5 и η = 0.3. Штриховая линия: гиперцепное приближение с потенциалом (4); сплошная линия: базовое гиперцепное приближение с потенциалом (5)



Рисунок 7 – Радиальные функции распределения, рассчитанные разными методами при Γ = 120, k = 1.5 и η = 10⁻⁶. Штриховая линия: гиперцепное приближение с потенциалом (4); сплошная линия: базовое гиперцепное приближение с потенциалом (5)



Рисунок 8 – Статические структурные факторы, рассчитанные разными методами при Γ = 10, k = 1.5 и η = 0.3. Штриховая линия: гиперцепное приближение с потенциалом (4); сплошная линия: базовое гиперцепное приближение с потенциалом (5)



Рисунок 9 – Статические структурные факторы, рассчитанные разными методами при Γ = 10, k = 1.5 и 10⁻⁶. Штриховая линия: гиперцепное приближение с потенциалом (4); сплошная линия: базовое гиперцепное приближение с потенциалом (5)



Рисунок 10 – Статические структурные факторы, рассчитанные разными методами при Г = 60, k = 1.5 и η = 0.3. Штриховая линия: гиперцепное приближение с потенциалом (4); сплошная линия: базовое гиперцепное приближение с потенциалом (5)



Рисунок 12 – Статические структурные факторы, рассчитанные разными методами при Г = 120, k = 1.5 и η = 0.3. Штриховая линия: гиперцепное приближение с потенциалом (4); сплошная линия: базовое гиперцепное приближение с потенциалом (5)

Из анализа полученных данных для статических структурных факторов можно сделать выводы, аналогичные сделанным для радиальных функций распределения. В частности, при малых плотностях упаковки и параметрах связи оба использованных метода дают практически совпадающие результаты. При этом величина первого пика на статическом структурном



Рисунок 11 – Статические структурные факторы, рассчитанные разными методами при Γ = 60, k = 1.5 и η = 10⁻⁶. Штриховая линия: гиперцепное приближение с потенциалом (4); сплошная линия: базовое гиперцепное приближение с потенциалом (5)



Рисунок 13 – Статические структурные факторы, рассчитанные разными методами при Г = 120, k = 1.5 и η = 10⁻⁶. Штриховая линия: гиперцепное приближение с потенциалом (4); сплошная линия: базовое гиперцепное приближение с потенциалом (5)

факторе в базовом гиперцепном приближении резко возрастает с увеличением плотности упаковки, а сам он, в отличие от радиальной функции распределения, располагается значительно левее такого же пика в гиперцепном приближении.

Данная работа выполнена в рамках проекта МОН РК 3120/ГФ4 «Самосогласованная модель

статических свойств пылевой плазмы с частицами конечных размеров».

Заключение

В данной работе была изучены радиальные функции распределения и статические структурные факторы пылевых частиц, рассчитанные разными методами. В частности, расчеты производились в рамках метода базового гиперцепного приближения с модели твердых заряженных шаров. Было установлено, что для частиц точечных размеров при не слишком больших значениях параметров связи результаты по корреляционным функциям системы не отличаются от обычного гиперцепного приближения с мостиковыми поправками. С увеличением плотности упаковки наблюдаются существенные различия обоих методов, свидетельствующее о необходимости учета конечности размеров пылевых частиц.

Литература

1 Fortov V. E., Morfill G. E. Complex and Dusty Plasmas: From Laboratory to Space. – Boca Raton, Florida: CRC Press, 2010. – 440 p.

2 Bonitz M., Horing N., Ludwig P. Introduction to Complex Plasmas. – Salmon Tower Building, New York City: Springer, 2010. – 450 p.

3 Khrapak S., Morfill G. Basic processes in complex (dusty) plasmas: Charging, interaction and ion drag force // Contrib. Plasma Phys. - 2009. - Vol. 49. - P. 148-168.

4 Shukla P. K. and Eliasson B. Colloquium: Fundamentals of dust-plasma interactions // Rev. Mod. Phys. – 2009. – Vol. 81. – P. 25-44.

5 Tsytovich V. N. New paradigm for plasma crystal formation // J. Phys. A: Math. Gen. – 2006. – Vol. 39 – P. 4501-4509.

6 Piel A. Plasma crystals: experiments and simulation // Plasma Phys. Control. Fusion - 2017. - Vol. 59. - 014001 (10 p.).

7 Dietz C., Thoma M. H. Investigation and improvement of three-dimensional plasma crystal analysis // Phys. Rev. E – 2016. – Vol. 94. – 033207 (8 p.).

8 Khlert H. and Bonitz M. How Spherical Plasma Crystals Form // Phys. Rev. Lett. - 2010. - Vol. 104. - P. 015001 (4 p.).

9 Shukla P. K. A survey of dusty plasma physics // Phys. Plasmas – 2001. – Vol. 8. – P. 1791-1803.

10 Fortov V. E., Khrapak A. G., Khrapak S. A., Molotkov V. I., Petrov O. F. Dusty plasmas // Physics-Uspekhi, - 2004. - Vol. 47. - P. 447 - 492

11 Seok J. Y., Koo B. C. and Hirashita H. Dust cooling in supernova remnants in the large magellanic cloud // Astrophys. J. - 2015. - Vol. 807. - P. 100-106.

12 Fedoseev A.V., Sukhinin G. I., Abdirakhmanov A. R., Dosbolayev M. K. and Ramazanov T. S. Voids in Dusty Plasma of a Stratified DC Glow Discharge in Noble Gases // Contrib. Plasma Phys. – 2016. – Vol. 56. – P. 234-239.

13 Tolias P., Ratynskaia S., de Angeli M., de Temmerman G., Ripamonti D., Riva G., Bykov I., Shalpegin A., Vignitchouk L., Brochard F., Bystrov K., Bardin S., Litnovsky A. Dust remobilization in fusion plasmas under steady state conditions // Plasma Phys. Control. Fusion – 2016. – Vol. 58. – P. 025009 (16 p.).

14 Castaldo C., Ratynskaia S., Pericolli V., de Angelis U., Rypdal K., Pieroni L., Giovannozzi E., Mad-daluno G., Marmolino C., Rufoloni A., Tuccillo A., Kretschmer M. and Morfill G. E. Diagnostics of fast dust particles in tokamak edge plasmas // Nucl. Fusion – 2007. – Vol. 47. – P. L5-L9.

15 Keidar M., Shashurin A., Volotskova O., Stepp M. A., Srinivasan P., Sandler A. and Trink B. Cold atmospheric plasma in cancer therapy // Phys. Plasmas – 2013. – Vol. 20. – P. 057101 (8 p.).

16 Walk R. M., Snyder J. A., Scrivasan P., Kirch J., Diaz S. O., Blanco F. C., Shashurin A., Keidar M. and Sandler A. D. Cold atmospheric plasma for the ablative treatment of neuroblastoma // J. Pediatr. Surg. – 2013. – Vol. 48. – P. 67-73.

17 Yousefi R., Davis A.B., Carmona-Reyes J., Matthews L.S., Hyde T.W. Measurement of net electric charge and dipole moment of dust aggregates in a complex plasma // Phys. Rev. E. – 2014. – Vol. 90. – P. 033101 (6 p.).

18 Ramazanov T.S., Bastykova N.Kh., Ussenov Y.A., Kodanova S.K., Dzhumagulova K.N., Dosbolayev M.K. The Behavior of Dust particles Near Langmuir Probe // Contrib. Plasma Phys. – 2012. – Vol. 52. – P. 110-113.

19 Bonitz M., Henning C., and Block D. Complex plasmas: a laboratory for strong correlations // Rep. Prog. Phys. – 2010. – Vol. 73. – P. 066501 (29 p.).

20 Kalman G., Hartmann P., Donko Z., Golden K. J., Kyrkos S. Collective modes in two-dimensional binary Yukawa systems // Phys. Rev. E – 2013. – Vol. 87. – P. 043103 (15 p.).

21 Khrapak S. A., Thomas H. M., Fluid approach to evaluate sound velocity in Yukawa systems and complex plasmas // Phys. Rev. E – 2015. – Vol. 91. – P. 033110 (8 p.).

22 Khrapak S. A., Thomas H. M., Filinov, V. S. and Fortov, V. E. and Bonitz, M. and Moldabekov, Zh. Fermionic path-integral Monte Carlo results for the uniform electron gas at finite temperature // Phys. Rev. E - 2015. – Vol. 91. – P. 033108 (12 p.).

23 Davletov A.E., Arkhipov Yu.V., Tkachenko I.M. Electric charge of dust particles in a plasma// Contrib. Plasma Phys. – 2016. – Vol. 56. – P. 308.

24 Iyetomi H., Ogata S., Ichimaru S. Bridge functions and improvement on the hypernetted-chain approximation for classical one-component plasmas// Phys. Rev. A – 1992. – Vol. 46. – P. 1051.

25 Daughton W., Murillo M.S., Thode L. Empirical bridge function for strongly coupled Yukawa systems// Phys. Rev. E – 2000. – Vol. 61. – P. 2129.

26 Wertheim M.S. Exact solution of the Percus-Yevick integral equation for hard spheres // Phys. Rev. Lett. - 1963. - Vol. 10, No 8. - P. 321.

27 Lado F. //Mol. Phys.- 1976. - Vol. 31. - P. 1117.

28 Lado F., Foiles S., Ashcroft N.W. Solutions of the reference-hypernetter-chain equation with minimized free energy// Phys. Rev. A – 1983. – Vol. 28. – P. 2374

29 Rosenfeld Y. Comment of the variational modified-hypernetted-chain theory for simple liquids// J. Stat. Phys. - 1986. - Vol. 42. - P. 437

References

1 V.E. Fortov and G.E. Morfill, Complex and Dusty Plasmas: From Laboratory to Space (CRC Press, Florida, USA, 2010), 440 p.

2 M. Bonitz and N. Horing, P. Ludwig, Introduction to Complex Plasmas (Springer Publishing, New York, 2010), 450 p.

- 3 S. Khrapak and G. Morfill, Contrib. Plasma Phys. 49, 148-168, (2009).
- 4 P.K. Shukla and B. Eliasson, Rev. Mod. Phys. 81, 25-44, (2009).
- 5 V.N. Tsytovich, J. Phys. A: Math. Gen. 39, 4501-4509, (2006).
- 6 A. Piel, Plasma Phys. Control. Fusion 59, 014001, (2017).

7 C. Dietz and M.H. Thoma, Phys. Rev. E. 94, 033207, (2016).

8 H. Khlert and M. Bonitz, Phys. Rev. Lett. 104, 015001, (2010).

9 P.K. Shukla, Phys. Plasmas 8, 1791-1803, (2001).

10 V.E. Fortov, A.G. Khrapak, S.A. Khrapak, V.I. Molotkov, and O.F. Petrov, Physics-Uspekhi 47, 447-492 (2004).

11 J.Y. Seok, B.C. Koo and H. Hirashita, Astrophys. J. 807, 100-106, (2015).

12 A.V. Fedoseev, G.I. Sukhinin, A.R. Abdirakhmanov, M.K. Dosbolayev and T.S. Ramazanov, Contrib. Plasma Phys. 56, 234-239, (2016).

13 P. Tolias, S. Ratynskaia, M. de Angeli, G. de Temmerman, D. Ripamonti, G. Riva, I. Bykov, A. Shalpegin, L.Vignitchouk, F. Brochard, K. Bystrov, S. Bardin, and A. Litnovsky, Plasma Phys. Control. Fusion 58, 025009, (2016).

14 C. Castaldo, S. Ratynskaia, V. Pericolli, U. de Angelis, K. Rypdal, L. Pieroni, E. Giovannozzi, G. Mad-dalu no, C. Marmolino, A. Rufoloni, A. Tuccillo, M. Kretschmer and G.E. Morfill, Nucl. Fusion 47, L5-L9, (2007).

15 M. Keidar, A. Shashurin, O. Volotskova, M.A. Stepp, P. Srinivasan, A. Sandler and B. Trink, Phys. Plasmas 20, 057101, (2013).

16 R.M. Walk, J.A. Snyder, P. Scrivasan, J. Kirch, S.O. Diaz, F.C. Blanco, A. Shashurin, M. Keidar and A.D. Sandler, J. Pediatr. Surg. 48, 67-73, (2013).

17 R. Yousefi, A.B. Davis, J. Carmona-Reyes, L.S. Matthews, and T.W. Hyde, Phys. Rev. E. 90, 033101, (2014).

18 T.S. Ramazanov, N.Kh. Bastykova, Y.A. Ussenov, S.K. Kodanova, K.N. Dzhumagulova, and M.K. Dosbolayev, Contrib. Plasma Phys. 52, 110-113, (2012).

19 M. Bonitz, C. Henning, and D. Block, Rep. Prog. Phys. 73, 066501, (2010).

- 20 G. Kalman, P. Hartmann, Z. Donko, K.J. Golden, and S. Kyrkos, Phys. Rev. E. 87, 043103, (2013).
- 21 S.A. Khrapak and H.M. Thomas, Phys. Rev. E. 91, 033110, (2015).
- 22 S.A. Khrapak, H.M. Thomas, V.S. Filinov, V.E. Fortov, M. Bonitz, and Zh. Moldabekov, Phys. Rev. E 91, 033108, (2015).

23 A.E. Davletov, Yu.V. Arkhipov, and I.M. Tkachenko, Contrib. Plasma Phys. 56, 308 (2016).

24 H. Iyetomi, S. Ogata, and S. Ichimaru, Phys. Rev. A 46, 1051, (1992).

- 25 W. Daughton, M.S. Murillo, and L. Thode, Phys. Rev. E. 61, 2129, (2000).
- 26 M.S. Wertheim, Phys. Rev. Lett. 10, 8, 321, (1963).
- 27 F. Lado Mol. Phys. 31, 1117, (1976).
- 28 F. Lado, S. Foiles, and N.W. Ashcroft, Phys. Rev. A. 28, 2374, (1983).
- 29 Y. Rosenfeld, J. Stat. Phys. 42, 437, (1986).

3-бөлім

ТЕОРИЯЛЫҚ ФИЗИКА. ЯДРО ЖӘНЕ ЭЛЕМЕНТАР БӨЛШЕКТЕР ФИЗИКАСЫ

Раздел 3

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА. ФИЗИКА ЯДРА И ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ

Section 3

THEORETICAL PHYSICS. NUCLEAR AND ELEMENTARY PARTICLE PHYSICS МРНТИ 29.05.45; 41.29.25

Арынгазин А.¹, Джунушалиев В.^{1,2,3}, Фоломеев В.^{1,3}

 ¹Институт фундаментальных исследований, Евразийский Национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан, e-mail: aringazin@gmail.com
 ²НИИЭТФ, Кафедра теоретической и ядерной физики, Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан, e-mail: v.dzhunushaliev@gmail.com
 ³Институт физико-технических проблем и материаловедения НАН КР, Бишкек, Кыргызстан, e-mail: vfolomeev@mail.ru

ДУХОВОЕ СКАЛЯРНОЕ ПОЛЕ В НЕЙТРОННОЙ ЗВЕЗДЕ

Рассмотрена модель нейтронной звезды, содержащей духовое скалярное поле. Нейтронная жидкость моделируется реалистичным уравнением состояния SLy, пригодным для описания вещества при высоких плотностях и давлениях, характерных для центральных областей нейтронных звёзд. Рассмотрены два типа скалярного поля – безмассовое и с потенциальной энергией, для которых исследованы случаи с тривиальной и нетривиальной топологией пространства-времени типа кротовой норы. Получена система дифференциальных уравнений в обыкновенных производных, описывающая гравитационное и скалярное поля, а также распределение нейтронной жидкости. Численным решением этой системы продемонстрировано влияние наличия духового поля на соотношение масса-радиус нейтронных звёзд и их внутреннюю структуру. Показано, что распределение полной плотности вещества рассматриваемых конфигураций существенно меняется в зависимости от свойств скалярного поля. Определены значения свободных параметров системы, при которых удаётся получить лучшее согласие модели с современными данными астрономических наблюдений.

Ключевые слова: кротовая нора, духовое скалярное поле, нейтронные звезды.

Aringazin A.¹, Dzhunushaliev V.^{1,2,3}, Folomeev V.³

¹Institute of Basic Research, L.N. Gumilev Eurasian National University.

Astana, Kazakhstan, e-mail: aringazin@gmail.com

²IETP, Department of Theoretical and Nuclear Physics,

al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan, e-mail: v.dzhunushaliev@gmail.com

³Institute of physical and technical sciences problems and materials science of the

National Academy of Sciences of the Kyrgyz Republic, Bishkek, Kyrgyzstan, e-mail: vfolomeev@mail.ru

Ghost scalar field in neutron star

The model of a neutron star containing a ghost scalar field is considered. The neutron fluid is modelled by a realistic Sly equation of state applicable for a description of matter at large energies and pressures typical for central regions of neutron stars. Two forms of the scalar field (massless and with a potential energy) are considered, for which the cases with trivial and nontrivial spacetime wormhole-like topologies are studied. The system of ordinary differential equations describing the distribution of the neutron fluid, gravitational and scalar fields is derived. By solving this system numerically, we demonstrate the influence of the presence of the ghost scalar field on the mass-radius relation of neutron stars and their internal structure. It is shown that the distribution of the total density of the configurations under consideration changes substantively depending on the properties of the scalar field. The values of free parameters of the system, for which one can obtain the best agreement of the model with the current observational astronomical data, are determined.

Key words: wormhole, ghost scalar field, neutron stars.

Арынғазин А.¹, Джунушалиев В.^{1,2,3}, Фоломеев В.^{1,3}

¹Іргелі зерттеулер институты, Л.Н. Гумилева ат. Евразиялық Ұлттық университеті, Қазақстан, Астана, e-mail: aringazin@gmail.com ²ЭТФҒЗИ, Теориялық және ядролық физика кафедрасы, әл-Фараби ат. Қазақ Ұлттық университеті, Қазақстан, Алматы, e-mail: v.dzhunushaliev@gmail.com ³ҚР ҰҒА Физика-техникалық проблемалар және материалтану институты, Қырғызстан, Бишкек, e-mail: vfolomeev@mail.ru

Нейтрондық жұлдызда елес скалярлы өріс

Елес скалярлы өрісі бар нейтронлық жұлдыздың моделі қарастырылған. Нейтрон жұлдыздардың центрлік аумағына тән жоғары тығыздық және қысым кезіндегі затты сипаттауға келетін нейтрондық сұйық Sly күй шыншыл теңдеуімен модельденеді. Скалярлы өрістің екі түрі қарастырылған – массасыз және потенциалдық энергиясы бар, олар үшін көртышқан іні типті кеңістік-уақыттың таптаурын және таптаурын емес топологиясына ие жағдайлар қарастырылған. Гравитациялық және скалярлы өрістерді, сондай-ақ, нейтрон сұйығының тарауын сипаттайтын кәдімгі туындыдағы дифференциалдық теңдеулер жүйесі алынды. Осы жүйені сандық түрде шешу арқылы елес өрістің нейтрон жұлдыздардың масса-радиусы қатынасына және ішкі құрылысына әсері бар екендігі көрсетілген. Қаралған көфигурациядағы толық зат тығыздығының таралуы скалярлы өрістің қасиетіне тәуелді екені көрсетілген. Модельдің заманауи астрономиялық бақылаулар деректерімен жақсы келесімі бар жүйенің ерік параметрлер мәні анықталған.

Түйін сөздер: көртышқан іні, елес скалярлы өріс, нейтрондық жұлдыздар.

Введение

Скалярные поля играют важную роль при описании различных процессов и структур в космологии и астрофизике. Они широко применяются при моделировании эволюции ранней и современной Вселенной. В последнем случае скалярные поля позволяют описывать современное ускоренное расширение Вселенной [1]. При этом используются как обычные скалярные поля, так и так называемые духовые (или фантомные) поля, имеющие противоположный знак перед кинетическим слагаемым в лагранжиане. Отличительной особенностью духовых скалярных полей является их возможность нарушать различные энергетические условия, включая световое условие энергодоминантности. На языке гидродинамики это соответствует тому, что эффективное давление духового поля отрицательно и больше (по модулю) плотности энергии. Такое свойство духовых полей обеспечивает сверхбыстрое расширение современной Вселенной, что подтверждается последними наблюдательными данными [1-5].

С другой стороны, способность духовых полей нарушать световое условие энергодоминантности может приводить к ещё одному интересному следствию. А именно, при рассмотрении статических систем, состоящих из полей такого рода, удаётся получать решения гравитационных уравнений, описывающие конфигурации с нетривиальной топологией пространства-времени – так называемые кротовые норы. В случае, когда вещество может свободно проходить через такие кротовые норы, они называются проходимыми [2-14]. При этом можно представить себе ситуацию, когда такие норы заполнены каким-либо веществом [15-18]. Здесь мы рассмотрим один из таких случаев, когда кротовая нора заполнена нейтронным веществом, моделируемым реалистичным уравнением состояния. В случае отсутствия скалярного поля такое вещество используется при описании обычных нейтронных звёзд. Нашей целью здесь будет выяснить, как наличие духового скалярного поля влияет на внутреннюю структуру нейтронных звёзд.

Действие и полевые уравнения

Мы будем рассматривать системы с тривиальной и нетривиальной топологией пространства-времени, состоящие из сильно гравитирующих духового скалярного поля φ и нейтронной жидкости. Полевые уравнения, описывающие такую конфигурацию, могут быть получены из варьирования действия

$$S = \int \left(-\frac{c^4}{16\pi G} R - \frac{1}{2} \partial_\mu \varphi \,\partial^\mu \varphi - V(\varphi) + L_{\rm fl} \right) \sqrt{-g} d^4 x. \tag{1}$$

координатах:

Здесь $V(\varphi)$ есть потенциальная энергия скалярного поля, а $L_{\rm fl}$ – лагранжиан жидкости.

Нашей цель будет поиск регулярных сферически-симметричных решений. Поскольку

$$ds^{2} = e^{\nu} (dx^{0})^{2} - dr^{2} - R^{2} (d\Theta^{2} + \sin^{2}\Theta \, d\phi^{2}), \qquad (2)$$

где ν и R есть функции только радиальной координаты r, а $x^0 = c t$ есть временная координата. При этом в центре конфигурации метрическая функция R, соответствующая радиусу 2-сферы, либо будет равна 0 (в случае систем с тривиальной топологией), либо будет

отличной от нуля (для систем с нетривиальной топологией). Варьируя действие (1) по метрике, можно получить гравитационные уравнения Эйнштейна, источником в которых будет следующий тензор энергии-импульса, получаемый при выборе $L_{\rm fl} = p$:

мы будем рассматривать конфигурации с

нетривиальной топологией, то для наглядности

удобно выбрать метрику в полярных гауссовых

$$T^{\mu}_{\nu} = (\varepsilon + p)u^{\mu}u_{\nu} - \delta^{\mu}_{\nu}p - \partial_{\nu}\varphi \,\partial^{\mu}\varphi - \delta^{\mu}_{\nu} \left[-\frac{1}{2}\partial_{i}\varphi \,\partial^{i}\varphi - V(\varphi) \right], \tag{3}$$

где ε и p есть плотность энергии и давление жидкости, u_{ν} – её 4-скорость.

Тогда уравнения Эйнштейна могут быть записаны в форме:

$$-\left[2\frac{R''}{R} + \left(\frac{R'}{R}\right)^2\right] + \frac{1}{R^2} = \frac{8\pi G}{c^4} T_t^t = \frac{8\pi G}{c^4} \left[\varepsilon - \frac{1}{2}\varphi'^2 + V(\varphi)\right],\tag{4}$$

$$-\frac{R'}{R}\left(\frac{R'}{R}+\nu'\right)+\frac{1}{R^2}=\frac{8\pi G}{c^4}T_r^r=\frac{8\pi G}{c^4}\left[-p+\frac{1}{2}\varphi'^2+V(\varphi)\right],$$
(5)

$$\frac{R''}{R} + \frac{1}{2}\frac{R'}{R}\nu' + \frac{1}{2}\nu'' + \frac{1}{4}\nu'^2 = -\frac{8\pi G}{c^4}T_{\Theta}^{\Theta} = \frac{8\pi G}{c^4}\left[p + \frac{1}{2}\varphi'^2 - V(\varphi)\right],\tag{6}$$

где штрих обозначает производную по *r*.

Используя эти выражения, $\mu = r$ компонента закона сохранения полного ТЭИ $T^{\nu}_{\mu;\nu} = 0$ даёт

$$\frac{dp}{dr} + \frac{1}{2}(\varepsilon + p)\frac{d\nu}{dr} = 0.$$
 (7)

Полевое уравнение для скалярного поля следует из варьирования действия (1) по φ :

$$\varphi^{\prime\prime} + \left(\frac{1}{2}\nu^{\prime} + 2\frac{R^{\prime}}{R}\right)\varphi^{\prime} = -\frac{dV}{d\varphi}.$$
 (8)

Таким образом, мы имеем пять неизвестных функций – R, ν , p, ε и φ , – для которых имеются пять уравнений (4)-(8), только четыре из которых независимы.

Эти уравнения дополняются уравнением состояния (УС), связывающим плотность энергии и давление нейтронной жидкости. Здесь мы воспользуемся хорошо известным из литературы реалистичным УС SLy, которое может быть представлено следующей аналитической аппроксимацией [19]:

$$\zeta = \frac{a_1 + a_2 \xi + a_3 \xi^3}{1 + a_4 \xi} f(a_5(\xi - a_6)) + (a_7 + a_8 \xi) f(a_9(a_{10} - \xi)) + (a_{11} + a_{12} \xi) f(a_{13}(a_{14} - \xi)) + (a_{15} + a_{16} \xi) f(a_{17}(a_{18} - \xi))$$
(9)

с $\zeta = \lg(p/дин \, \mathrm{сm}^{-2}), \xi = \lg(\rho/\Gamma \, \mathrm{cm}^{-3})$, где ρ есть плотность нейтронного вещества, а $f(x) = [\exp(x) + 1]^{-1}$. Значения коэффициентов a_i могут быть найдены в [19]. Это УС хорошо работает при высоких плотностях и давлениях, типичных для внутренних областей нейтронных звёзд.

Результаты численных расчётов

Для выполнения численных расчётов удобно ввести безразмерные переменные. В зависимости от того, обладает ли система тривиальной или нетривиальной топологией пространства-времени, будем использовать разные безразмерные переменные.

Система с тривиальной топологией В этом случае вводим новые переменные

$$x = \frac{r}{L}, \Sigma = \frac{R}{L}, \varphi(x) = \frac{\sqrt{8\pi G}}{c^2} \varphi(r)$$

где $L = \frac{c}{\sqrt{8\pi G \rho_c}}$.

Тогда уравнения (4)-(8) с учётом (9) дадут следующую безразмерную систему:

$$-\left[2\frac{\Sigma''}{\Sigma} + \left(\frac{\Sigma'}{\Sigma}\right)^2\right] + \frac{1}{\Sigma^2} = 10^{\xi - \xi_c} - \frac{1}{2}\varphi'^2 + V(\varphi), \tag{10}$$

$$-\frac{\Sigma'}{\Sigma}\left(\frac{\Sigma'}{\Sigma}+\nu'\right)+\frac{1}{\Sigma^2}=-\sigma 10^{\zeta-\zeta_c}+\frac{1}{2}\varphi'^2+V(\varphi),$$
(11)

$$\frac{\Sigma''}{\Sigma} + \frac{1}{2} \frac{\Sigma'}{\Sigma} \nu' + \frac{1}{2} \nu'' + \frac{1}{4} \nu'^2 = \sigma 10^{\zeta - \zeta_c} + \frac{1}{2} \varphi'^2 - V(\varphi), \tag{12}$$

$$\frac{d\xi}{dx} = -\frac{1}{2\ln 10} \frac{1}{d\zeta/d\xi} \left(c^2 10^{\xi-\zeta} + 1 \right) \frac{d\nu}{dx'}$$
(13)

$$\phi^{\prime\prime}\left(\frac{1}{2}\nu^{\prime}+2\frac{\Sigma^{\prime}}{\Sigma}\right)\phi^{\prime}=-\frac{dV}{d\phi}.$$
(14)

Здесь $\sigma = p_c/(\rho_c c^2)$ – релятивистский фактор, где $\rho_c \equiv 10^{\xi_c}, p_c \equiv 10^{\zeta_c}$ – центральные плотность и давление жидкости. Входящую в эти уравнения потенциальную энергию скалярного здесь мы выбираем в форме хорошо известного потенциала типа Хиггса:

$$V(\phi) = -\frac{1}{2}m^2\phi^2 + \frac{1}{4}k\phi^4,$$
 (15)

где m, k – свободные параметры поля, значения которых выбираются из требования получения необходимых характеристик исследуемых объектов.

Эти уравнения решаются с граничными условиями, задаваемыми в окрестности центра следующими разложениями:

$$\xi \approx \xi_c, \Sigma \approx x, \nu \approx \nu_c + \frac{1}{2}\nu_2 x^2, \varphi \approx \varphi_c + \frac{1}{2}\varphi_2 x^2, \qquad (16)$$

где коэффициенты разложения есть

$$\nu_2 = \sigma + \frac{1}{2} \phi_c^2 \left(m^2 - \frac{1}{2} k \phi_c^2 \right), \phi_2 = \frac{1}{3} \phi_c (m^2 + k \phi_c^2).$$
(17)

Задавая различные центральные плотности жидкости ξ_c , типичные для нейтронных звёзд, мы подбирали центральное значение скалярного поля ϕ_c таким образом, чтобы асимптотически (далеко от поверхности жидкости) плотность энергии поля стремилась к нулю. Это обеспечивает получение конфигураций с асимптотически плоским пространством-временем. Используя эти граничные условия, мы численно

решали уравнения (10)-(14), стартуя с некоторой точки вблизи начала координат (т.е. в окрестности x = 0) и интегрируя до точки $x = x_b$, где плотность нейтронного вещества падала до величины $\rho_b \approx 10^6 \text{г см}^{-3}$. Мы берём эту точку в качестве границы звезды. Эта плотность соответствует внешней границе коры нейтронной звезды, вплоть до которой используемое здесь УС (9) остаётся справедливым [19].

Система с нетривиальной топологией

Здесь мы будем рассматривать случай безмассового скалярного поля, т.е. положим $V(\phi) = 0$. В окрестности центра потенциал поля может быть разложен как

$$\varphi \approx \varphi_1 r + \frac{1}{6} \varphi_3 r^3, \qquad (18)$$

где φ_1 есть производная в центре. Её квадрат соответствует «кинетической» энергии скалярного поля. Тогда удобно ввести следующие безразмерные переменные:

$$x = \frac{r}{L}, \Sigma = \frac{R}{L}, \varphi(x) = \frac{\sqrt{8\pi G}}{c^2} \varphi(r),$$

где $L = \frac{c^2}{\sqrt{8\pi G} \varphi_1}.$ (19)

В результате получится система безразмерных уравнений, аналогичная (10)-(14). (Чтобы не перегружать статью, мы не будем выписывать эту систему.) Граничные условия для такой системы выбираются в центре конфигурации в виде

$$\Sigma = \Sigma_c, \nu = \nu_c, \varphi = 0, \varphi' = 1, \xi = \xi_c.$$

Нетривиальная топология пространства-времени выражается в наличие в системе кротовой норы с радиусом горловины $\Sigma_c = (1/2 - p_c/\varphi_1^2)^{-1/2}$. В рассматриваемом здесь случае горловина заполнена нейтронным веществом, описываемым УС (9). Как и в случае с тривиальной топологией нашей целью является поиск регулярных решений с конечным размером поверхности жидкости.



Рисунок 1 – Соотношения масса-радиус для систем с тривиальной топологией (обозначены как ТР) и нетривиальной топологией (обозначены цифрами для L = 3,5,7 км соответственно). Массы даны в массах Солнца M_{\odot} . Точечный контур показывает область наблюдательных ограничений [20]. Треугольниками показаны конфигурации с массой $M \approx 1,56M_{\odot}$, для которых построены графики на рис. 2.



Рисунок 2 – Распределения по радиусу полной плотности энергии (левый рисунок) и скалярного поля (правый рисунок) для систем, показанных треугольниками на рис. 1. Для наглядности на правом рисунке масштаб скалярного поля для системы с тривиальной топологией увеличен втрое

Результаты численных расчётов представлены на рис. 1 и 2. На рис. 1 показаны соотмасса-радиус ношения для исследуемых систем. Здесь точечный контур соответствует наблюдательных ограничений, области нейтронных полученных для звёзд ИЗ астрономических наблюдений [20]. Свободные параметры рассматриваемых конфигураций подбирались таким образом, чтобы рассчитанные кривые лежали (хотя бы частично) В области наблюдательных ограничений. А именно, для системы с тривиальной топологией выбирались следующие параметры потенциальной энергии (15): m = 0,1 и k = 10. Для системы с нетривиальной топологией свободным параметром является характерный размер конфигурации L, который здесь мы выбирали равным L = 3,5,7 км. При этом для всех рассматриваемых систем центральная плотность жидкости $\rho_c \sim 10^{15} \, \mathrm{r} \, \mathrm{cm}^{-3}$, т.е. типичное значение для нейтронных звёзд. Как видно из рис. 1, изменение свободных параметров рассматриваемых систем существенно меняет поведение кривых масса-радиус.

Помимо изменений соотношения масса-радиус, наличие в системе нетривиальной топологии приводит также к изменениям распределений полной плотности энергии вдоль радиуса конфигурации. Для рассматриваемых здесь систем эти изменения проиллюстрированы на рис. 2. Как можно видеть, наличие в системе духового скалярного поля, дающего отрицательный вклад в полную плотность энергии, приводит к тому, что в некоторых областях вдоль радиуса системы полная плотность может становиться отрицательной. Это, в итоге, способствует наличию в системе нетривиальной топологии, обеспечиваемой скалярным полем с нарушенным световым условием энергодоминантности. В свою очередь система с тривиальной топологией, несмотря на отрицательный вклад, даваемый кинетическим слагаемым в полную плотность энергии, везде имеет положительную плотность энергии, распределение которой похоже на соответствующее распределение у обычных нейтронных звёзд, описываемых УС (9).

Заключение

Мы рассмотрели смешанные сильно гравитирующие конфигурации, состоящие из нейтронного вещества и духового скалярного поля. Наличие последнего может приводить к появлению в системе нетривиальной топологии пространства-времени типа кротовой норы. В нашем случае такая кротовая нора заполнена нейтронной жидкостью. Целью статьи было выяснить, как присутствие двух различных типов духового скалярного поля (безмассового и с потенциальной энергией) влияет на внутреннюю структуру и соотношение масса-радиус обычных нейтронных звёзд.

Для этого были исследованы конфигурации с тривиальной и нетривиальной топологией пространства-времени. Для систем первого типа потенциальная энергия выбиралась в виде (15), а для систем с нетривиальной топологией было использовано безмассовое скалярное поле. В обоих случаях нейтронная жидкость моделировалась реалистичным УС в форме (9). При этом свободные параметры систем подбирались таким образом, чтобы массы и размеры получаемых конфигураций укладывались в наблюдательные ограничения. Полученные в итоге результаты показывают, что наличие нетривиальной топологии существенно меняет как поведение кривой масса-радиус (см. рис. 1), так и распределение вещества по радиусу (см. рис. 2). При этом с точки зрения удалённого наблюдателя такие системы будут похожи на обычные нейтронные звёзды, а отличия в их внутренней структуре могут сказываться на эволюции таких объектов с течением времени.

Благодарности

Авторы благодарны гранту №266 Министерства образования и науки Республики Казахстан за финансовую поддержку.

Литература

¹ Amendola L. and Tsujikawa S. Dark energy: theory and observations. - Cambridge: England: Cambridge University Press, 2010. - 491 p.

² Perlmutter S., Turner M.S. and White M.J. Constraining dark energy with SNe Ia and large scale structure // Phys. Rev. Lett. -1999. -Vol. 83. -P. 670-673.

3 Bennett C.L. et al. [WMAP Collaboration] First year Wilkinson Microwave Anisotropy Probe (WMAP) observations: Preliminary maps and basic results // Astrophys. J. Suppl. -2003. –Vol.148. –P. 1-27.

4 Sullivan M. et al. SNLS3: Constraints on Dark Energy Combining the Supernova Legacy Survey Three Year Data with Other Probes // Astrophys. J. -2011. -Vol. 737:102. - 47 p.

5 Ade P. A. R. et al. [Planck Collaboration] Planck 2015 results. XIII. Cosmological parameters // Astron. Astrophys. -2016. -Vol. 594:A13. - 63 p.

6 Visser M. Lorentzian wormholes: From Einstein to Hawking. -New York: Woodbury, 1996. -412 p.

7 Armendariz-Picon C. On a class of stable, traversable Lorentzian wormholes in classical general relativity // Phys. Rev. -2002. -Vol. D65:104010. -22 p.

8 Sushkov S. V. and Kim S.W. Wormholes supported by the kink-like configuration of a scalar field // Classical Quantum Gravity. -2002. -Vol. 19. -P. 4909-4922.

9 Lemos J.P.S., Lobo F.S.N., and de Oliveira S.Q. Morris-Thorne wormholes with a cosmological constant // Phys. Rev. -2003. -Vol. D68:064004. - 49 p.

10 Kardashev N.S., Novikov I.D., and Shatskiy A.A. Astrophysics of Wormholes // Int. J. Mod. Phys. -2007. -Vol. D16. -P. 909-926.

11 Gonzalez J.A., Guzman F.S., and Sarbach O.Instability of wormholes supported by a ghost scalar field. I. Linear stability analysis // Classical Quantum Gravity. -2009. -Vol.26:015010. - 12 p.

12 Bronnikov K.A., Fabris J.C., and Zhidenko A. On the stability of scalar-vacuum space-times // Eur. Phys. J. -2011. -Vol. C71:1791. -11 p.

13 Lobo F.S.N. Phantom energy traversable wormholes // Phys. Rev. D -2005. - Vol. 7:1084011. -9 p.

14 Lobo F.S.N. Wormholes, Warp Drives and Energy Conditions // Fundam. Theor. Phys. -2017. -Vol. 189. - 303 p.

15 Dzhunushaliev V., Folomeev V., Kleihaus B. and Kunz J. A Star Harbouring a Wormhole at its Core // J. Cosmol. Astropart. Phys. -2011. -Vol. 1104:031. -19 p.

16 Dzhunushaliev V., Folomeev V., Kleihaus B. and Kunz J. Mixed neutron star-plus-wormhole systems: Equilibrium configurations // Phys. Rev. -2012. -Vol. D85:124028. -14 p.

17 Charalampidis E., Ioannidou T., Kleihaus B. and Kunz J. Wormholes Threaded by Chiral Fields // Phys. Rev. -2013. -Vol. D87:084069. -19 p.

18 Dzhunushaliev V., Folomeev V., Hoffmann C., Kleihaus B. and Kunz J. Boson Stars with Nontrivial Topology // Phys. Rev. – 2014. – Vol. D90:124038. – 18 p.

19 Haensel P., Potekhin A. Y. Analytical representations of unified equations of state of neutron-star matter // Astron. Astrophys. -2004. -Vol. 428. -P.191-197.

20 Ozel F., Baym G., Guver T. Astrophysical Measurement of the Equation of State of Neutron Star Matter // Phys. Rev. -2010. -Vol. D82:101301. -4 p.

References

1 L. Amendola and S. Tsujikawa, Dark energy: theory and observations (Cambridge: England: Cambridge University Press, 2010), 491 p.

2 S. Perlmutter, M.S. Turner and M.J. White, Phys. Rev. Lett. 8, 670-673, (1999).

- 3 C.L. Bennett et al. [WMAP Collaboration], Astrophys. J. Suppl. 148, 1-27, (2003).
- 4 M. Sullivan et al. Astrophys. J. 737, 102-149, (2011).
- 5 P.A.R. Ade et al. [Planck Collaboration], Astron. Astrophys. 594, A13-A76, (2016).
- 6 M. Visser, Lorentzian wormholes: From Einstein to Hawking (New York: Woodbury, 1996), 412 p.
- 7 C. Armendariz-Picon, Phys. Rev. D 65, 104010, (2002).
- 8 S.V. Sushkov and S.W. Kim, Classical Quantum Gravity, 19, 4909-4922, (2002).
- 9 J.P.S. Lemos, F.S.N. Lobo, and S.Q. de Oliveira, Phys. Rev. D 68, 064004, (2003).
- 10 N.S. Kardashev, I.D. Novikov, and A.A. Shatskiy, Int. J. Mod. Phys. D 16, 909-926, (2007).
- 11 J.A .Gonzalez, F.S. Guzman, and O. Sarbach, Classical Quantum Gravity 26, 15010, (2009).
- 12 K.A. Bronnikov, J.C. Fabris, and A. Zhidenko, Eur. Phys. J. C 71, 1791, (2011).
- 13 F.S.N. Lobo, Phys. Rev. D 7, 1084011, (2005).
- 14 F.S.N. Lobo, Fundam. Theor. Phys. 189, 303, (2017).
- 15 V. Dzhunushaliev, V. Folomeev, B. Kleihaus and J. Kunz, J. Cosmol. Astropart. Phys. 1104, 031, (2011).
- 16 V. Dzhunushaliev, V. Folomeev, B. Kleihaus and J. Kunz, Phys. Rev. D 85, 124028, (2012).
- 17 E. Charalampidis, T. Ioannidou, B. Kleihaus and J. Kunz, Phys. Rev. D 87, 084069, (2013).
- 18 V. Dzhunushaliev, V. Folomeev, C. Hoffmann, B. Kleihaus and J. Kunz, Phys. Rev. D 90, 124038, (2014).
- 19 P. Haensel and A.Y. Potekhin, Astron. Astrophys. 428, 191-197, (2004).
- 20 F. Ozel, G. Baym, and T.Guver, Phys. Rev. D 82, 101301, (2010).

МРНТИ 89.21.21

Демченко Б.И.¹, Комаров А.А.^{1,2*}, Серебрянский А.В.¹, Усольцева Л.А.¹, Акниязов Ч.Б.¹

¹Астрофизический институт им. В. Г. Фесенкова, Казахстан, Алматы ²Казахский Национальный университет им. аль-Фараби, Казахстан, Алматы, ^{*}e-mail: komandr65@gmail.com

ОСОБЕННОСТИ ДВИЖЕНИЯ ГЕОСТАЦИОНАРНЫХ СПУТНИКОВ

Дано определение идеального геостационарного спутника (ГСС). Практически невозможно вывести ГСС строго на идеальную орбиту. Показано отличие реального ГСС от идеального. Обсуждена проблема каталогизации ГСС. По мере запуска новых объектов или коррекции орбит уже существующих ГСС, текущий каталог приходится постоянно дополнять и обновлять. Изложена упрощенная теория изменения долготы ГСС со временем с учетом 2-й секториальной гармоники в разложении геопотенциала. На основе этой теории выделены два класса неуправляемых ГСС (либрационные и дрейфующие), и дана оценка резонансных возмущений для обоих классов. Приведена эмпирическая эволюционная диаграмма "наклон-узел" для плоскости орбиты ГСС в интервале 1991-2016 гг.

Ключевые слова: геостационарный спутник, геостационарная орбита, теория движения ИСЗ.

Demchenko B.I.¹, Komarov A.A.^{1,2*}, Serebryanskiy A.V.¹, Usoltseva L.A.¹, Akniyazov Ch.B.¹ ¹V.G. Fesenkov Astrophysical Institute, Kazakhstan, Almaty ²al-Farabi Kazakh National University, Kazakhstan, Almaty ^{*}e-mail: komandr65@gmail.com

Peculiarities of movement of geostationary satellites

The definition of an ideal geostationary satellite (GSS) is given. It is practically impossible to deduce a GSS strictly on an ideal orbit. The difference between the real GSS and the ideal is shown. The problem of GSS cataloging is discussed. As the launch of new objects or correction of orbits of already existing satellites, the current directory has to be constantly supplemented and updated. A simplified theory of the longitude change of the GSS with time is given, taking into account the second sectorial harmonic in the expansion of the geopotential. On the basis of this theory, two classes of uncontrolled GSS (libration and drifting) are distinguished, and an estimate of the resonant perturbations for both classes is given. An empirical evolutionary «inclination-node» diagram for the orbital plane of the GSS for the period 1991-2016 is given.

Key words: Geostationary satellite, geostationary orbit, theory of motion of artificial satellites of the Earth (AES).

Демченко Б.И.¹, Комаров А.А.^{1,2*}, Серебрянский А.В.¹, Усольцева Л.А.¹, Ақниязов Ч.Б.¹ ¹В.Г. Фесенков атындағы астрофизикалық институт, Қазақстан, Алматы қ. ²Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Қазақстан, Алматы қ., ^{*}e-mail: komadr65@gmail.com

Геостационар серіктердің қозғалыстарының ерекшелігі

Мінсіз геостационар серіктердің (МГС) анықтамасы берілді. Практика жүзінде МСС тура идеалды орбитасына шығару мүмкін емес. Нақты ГСС мінсізден айырмашылығы көрсетілді. ГСС

каталогтау мәселелері талқыланды. Жаңа объектілерді немесе бар МГС-дің орбитасын жөндеу барысында, ағымды каталогды әрдайым толықтырып және жаңарту еңгізу тура келек болады. Геопотенциалдың жіктелуінде 2-секторлық бүктемесі есебімен уақыт өте келе МГС бойлығы өзгерістерінің жеңілдетілген теориясы келтірілді. Осы теория негізінде басқарылмайтын МГС екі тобы (либрациялық және ауытқыған) көрсетілді және екі топтар үшін де резонанстық ауытқулар бағалауы берілді. 1991-2016 жж. интервалында МГС орбиталар жазықтығы үшін "еңіс-түйін" эмпирикалық эволюциялық диаграммасы келтірілді.

Түйін сөздер: геостационар серігі, геостационарлы орбита, ЖЖС қозғалыс теориясы

Введение

Общие замечания

Для идеального геостационарного спутника (ГСС) период обращения вокруг Земли точно равен 1440 минут звездного времени, или 1436.0682 минут солнечного времени. Эксцентриситет *е* орбиты и наклон *i* плоскости орбиты к плоскости земного экватора равны нулю. Долгота восходящего узла орбиты Ω и аргумент перигея ω неопределены, поэтому их также можно считать нулевыми. При таких параметрах космический объект будет в любой момент времени находиться над одной и той же точкой земной поверхности, причем сама эта «подспутниковая» точка расположена на земном экваторе.

Реальный ГСС в той или иной мере всегда отличается от идеального по многим причинам. Практически невозможно вывести ГСС строго на идеальную орбиту. Но даже если это удается сделать, то элементы орбиты ГСС будут с течением времени изменяться под действием различных возмущающих факторов (высшие гармоники в разложении геопотенциала, гравитационные возмущения от Луны и Солнца, световое давление, солнечный ветер и др., включая релятивистские эффекты). Обычно под множеством ГСС понимают космические объекты, имеющие период обращения вокруг Земли от 22 до 26 часов и наклон плоскости орбиты к плоскости экватора не более 16⁰ [1-3].

Каталоги ГСС

Проблема каталогизации ИСЗ, в том числе ГСС, отличается от каталогизации других астрономических объектов (звезд, галактик, астероидов и т.п.). Здесь приходится учитывать искусственное происхождение объектов, их функциональное назначение и быстрое изменение орбитальных параметров. По мере запуска новых объектов или коррекции орбит уже существующих ГСС, текущий каталог приходится постоянно дополнять и обновлять. Два каталога ГСС с разницей по времени в один год, или даже в 1-2 месяца – это уже два разных каталога. В настоящее время достаточно полно каталогизировано около 1900 ГСС с характерными размерами от метра и более. Из них только 25% это работающие корректируемые спутники, и 75% – неуправляемые ГСС, представляющие собой техногенный космический мусор (space debris). Количество геостационаров меньших размеров оценивается в десятки тысяч, но они труднодоступны для наземных наблюдений [4].

Наиболее полной информацией о состоянии геостационарной области располагает космический центр им. Л. Джонсона (Хьюстон, США). Европейский космический центр (ESOC) периодически издает списки ГСС (LOG, List Of Geostationary, [5]). Эти списки предназначены для обслуживания научных программ наблюдения ГСС. В дополнение к LOG, в Интернет регулярно поставляются так называемые «двухстрочники» (TLE, Two-Lines-Elements [6]). Основной недостаток этих списков - отсутствие фотометрических данных, которые весьма полезны для идентификации спутников. Соответствующие российские организации также издают свои каталоги [7]. В этих каталогах, в дополнение к орбитальным параметрам, для каждого объекта дается его интегральная звездная величина, что существенно облегчает поиск и идентификацию конкретного ГСС в процессе наблюдений.

Принято считать, что в геостационарной зоне находятся исключительно искусственные объекты. Это утверждение не опровергнуто, но и не доказано. В принципе можно предположить, что по крайней мере вблизи двух устойчивых точек либрации с долготами 75° и 255° (см. ниже), существуют и естественные спутники небольших размеров. Отличить искусственные объекты от естественных можно по их оптическим характеристикам (фотометрическим, спектрофотометрическим, поляризационным), поскольку искусственные покрытия (например, солнечные батареи) в естественной среде не встречаются. Можно также ожидать, что вблизи точек либрации концентрируются фрагменты космического мусора как искусственного, так и естественного происхождения, вплоть до пылевой составляющей.

Гравитационное поле Земли

Гравитационный потенциал материальной точки массы M на расстоянии r от нее дается выражением U=GM/r. Здесь $G=6.672 \cdot 10^{-11}$ м³/

(кг·с²) – гравитационная постоянная. В формулы небесной механики почти всегда входит произведение $\mu = GM$, которое известно точнее, чем *G* и *M* по отдельности. Для Земли $\mu = (3.986005 \pm 0.000003) \cdot 10^{14} \text{ м}^3/\text{c}^2$ (система астрономических постоянных MAC 1976, [8]). Потенциал Земли отличается от потенциала материальной точки. Он описывается разложением по сферическим функциям [9]:

$$U = \frac{\mu}{r} \left\{ 1 + \sum_{n=2}^{\infty} \left(\frac{R}{r} \right)^n \cdot \left[J_n \cdot P_n(\sin\varphi') + \sum_{k=1}^n J_{nk} \cdot P_{nk}(\sin\varphi') \cdot \cos(k(\lambda - \lambda_{nk})) \right] \right\},\tag{1}$$

 J_n, J_{nk} – безразмерные постоянные, характеризующие фактическую форму Земли и распределение масс внутри нее; λ_{nk} – характерные долготы, отдельно для каждой гармоники; $P_n(\mathbf{x}), P_{nk}(\mathbf{x})$ – полиномы Лежандра и присоединенные функции Лежандра, φ', λ – геоцентрическая широта и восточная долгота подспутниковой точки, R – экваториальный радиус Земли, R=6378.140±0.005 км (MAC 1976). Общее выражение для полиномов и присоединенных функций Лежандра можно получить из формул Родрига:

$$P_{n}(x) = \frac{1}{2^{n} n!} \cdot \frac{d^{n}}{dx^{n}} ((x^{2} - 1)^{n});$$
$$P_{nk}(x) = (-1)^{k} \cdot (1 - x^{2})^{k/2} \cdot \frac{d^{k} P_{n}(x)}{dx^{k}}$$

При задании географических координат пункта наблюдений обычно дается его геодезическая широта φ . Она определяется как угол наклона между нормалью к поверхности геоида и плоскостью земного экватора. Для перехода от геодезической широты φ к геоцентрической φ' служит формула $tg(\varphi') = (1 - \varepsilon)^2 \cdot tg(\varphi)$, где $\varepsilon = 1/298.257 - сжатие земного сфероида. Макси$ $мальное отличие <math>\varphi$ от φ' равно 11.5' и достигается на широте 45⁰. В линейном измерении на поверхности Земли эта разность составляет 21 км. Заметим, что широта Алматы равна 43⁰. На экваторе и земных полюсах значения φ и φ' совпадают.

Слагаемые в формуле (1), содержащие множитель $P_n(\sin \varphi')$, называются зональными гармониками. Слагаемые с множителями $P_{nk}(\sin \varphi')$ называются секториальными (при k=n) или тессеральными (при k < n) гармониками.

Расстояние от центра Земли до геостационарной орбиты равно: r=42164 км. Для типичного ГСС отношение R/r равно 6378/42164=0.15. Следовательно, при прочих равных условиях влияние текущего члена разложения в формуле (1) составляет всего 15% от предыдущего члена. Поэтому для ГСС наиболее существенными являются первые слагаемые, то есть зональная гармоника J_2 и секториальная гармоника J_{22} . Численные значения этих коэффициентов таковы: динамический коэффициент сжатия Земли J_2 =1082.63·10⁻⁶ (это наибольший коэффициент), динамический коэффициент сжатия земного экватора J_{22} =2.7·10⁻⁶. Значения остальных коэффициентов J_n и J_{nk} менее 2.8·10⁻⁶ [9].

Резонансные ИСЗ

Для произвольных ИСЗ влияние долготных членов в разложении геопотенциала (1) порождает только периодические возмущения, их амплитуда убывает с ростом индекса *n*. Но если период обращения ИСЗ вокруг Земли соизмерим с собственным периодом вращения Земли вокруг своей оси, то возникают резонансные эффекты, под влиянием которых амплитуды периодических возмущений с течением времени могут возрастать. С математической точки зрения это связано с появлением малых делителей в любой тригонометрической теории движения ИСЗ. Например, резонансными являются спутники с периодами 12^h (резонанс 1/2), 8^h (резонанс 1/3), 16^h (резонанс 2/3) и т.д. В этом смысле геостационарные спутники являются самыми резонансными, так как они имеют предельный резонанс 1/1. Понятно, что теория движения резонансных ИСЗ должна отличаться от теории движения произвольных спутников Земли.

Зависимость долготы ГСС от времени. Дрейф по долготе

Если известен «мгновенный» инерциальный период обращения ГСС вокруг Земли, то скорость изменения долготы ГСС (среднесуточный дрейф по долготе) в данное время можно вычислить по формуле:

$$D = 360^{\circ} \cdot \left(\frac{1440}{P_s} - 1.0027379093\right), \qquad (2)$$

где D – дрейф по долготе, ⁰/сут, P_s – сидерический (или звездный) период обращения ГСС вокруг Земли в минутах солнечного времени. Если P_s =1436.0682, то D=0. При D<0 ГСС в данный момент дрейфует с востока на запад (долгота убывает), при D>0 ГСС движется с запада на восток (долгота возрастает).

Резонансное влияние долготных членов в разложении геопотенциала, прежде всего секториальной гармоники J_{22^2} , приводит к тому, что на геостационарной орбите имеются два устойчивых положения равновесия с долготами $\lambda_{1=}^{75^0}$ и $\lambda_2=255^0$ (они же – точки либрации, см. ниже) и два неустойчивых положения, отстоящих от устойчивых точек примерно на 90°. Первая точка либрации 75° почти равна долготе Алматы (77°), вторая точка 255° близка к средней долготе США.

В теории движения геостационаров используется понятие «стробоскопическая долгота» [1, 2, 10]. Это некоторая средняя долгота ГСС, не зависящая от эксцентриситета и наклона орбиты. Она определяется формулой $\lambda = \Omega + \omega + M - S$, где ω – аргумент перигея, M – средняя аномалия ГСС на данный момент времени, S – текущее звездное время в Гринвиче. В рамках упрощенной трехосной модели Земли зависимость стробоскопической долготы λ неуправляемого ГСС от времени достаточно хорошо описывается дифференциальным уравнением типа уравнения математического маятника на жестком невесомом стержне [3, 11]:

$$\frac{d^2\lambda}{dt^2} + \frac{D_k^2}{2} \cdot \sin(2(\lambda - \lambda_L)) = 0, \qquad (3)$$

где λ_L – долгота одной из двух точек либрации. Для нас удобнее брать значение $\lambda_L = \lambda_1 = 75^\circ$. Основное отличие уравнения (3) от уравнения математического маятника заключается в том, что у маятника имеется только одно положение устойчивого равновесия (нижняя точка) и одно положение неустойчивого равновесия (верхняя точка). У ГСС имеется два устойчивых и два неустойчивых положения равновесия. Две точки устойчивого равновесия еще называются точками либрации.

Для Земли внешний параметр D_k равен 0.437 ⁰/сутки. Он играет роль критического дрейфа по долготе, то есть скорости изменения долготы при прохождении ГСС какой-либо точки либрации. Если дрейф в этой точке меньше D_k , то реализуется режим колебаний, если больше – режим вращений. Соответственно, неуправляемые ГСС делятся на два класса. Класс «L» – либрационные ГСС. Они совершают долгопериодические колебания около одной из двух точек либрации. Период колебаний от 2 до 6 лет, амплитуда до 80°. Класс «D» – дрейфующие ГСС. Они постоянно двигаются в одном направлении, с востока на запад или с запада на восток.

Решение уравнения (3) выражается через эллиптические функции и стандартные эллиптические интегралы. Пусть $D_0 = (d\lambda/dt)_0 - дрейф$ по долготе в начальный момент времени t_0 ; $\lambda_0 - долгота ГСС на этот же момент. Эти два параметра играют роль начальных условий для уравнения (3) и могут быть определены из наблюдений.$

Максимальный дрейф по долготе *D_m* для данного ГСС при прохождении точек либрации определяется из начальных условий по формуле

$$D_m^2 = D_0^2 + D_k^2 \cdot \sin^2(\lambda_0 - \lambda_L).$$
 (4)

Знак D_m совпадает со знаком D_0 . В рамках модели (3) этот параметр для конкретного пассивного ГСС постоянен и может служить одной из его характеристик, наряду с другими элементами орбиты. Далее, введем обозначения:

$$k^{2} = (D_{m}/D_{k})^{2}; k_{1} = 1/k;$$

$$F(\varphi,k) = \int_{0}^{\varphi} \frac{d\varphi}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2(\varphi)}}; \quad K(k) = F(\pi/2,k), (5)$$

k — модуль эллиптических функций, $F(\varphi,k)$, K(k) — неполный и полный эллиптические интегралы 1-го рода в канонической записи. Характер движения типичного пассивного ГСС определяется значением параметра *k*.

5.1. При k < l – либрационный режим, $D_m < D_k$. Для земного наблюдателя геостационар совершает долгопериодические колебания по долготе около одной из двух точек либрации. Амплитуда этих колебаний A(град) и период P(сутки) определяются формулами:

$$A = 57.29578 \cdot \arcsin k ,$$

$$P = 57.29578 \cdot \frac{4 \cdot K(k)}{D_k}$$
(6)

Эти два параметра также могут служить дополнительными характеристиками конкретного пассивного либрационного ГСС и использоваться для его идентификации. Текущая стробоскопическая долгота ГСС (в рад) и дрейф по долготе на произвольный момент времени вычисляются по формулам:

$$\lambda = \lambda_L + \arcsin(k \cdot sn(u,k));$$

$$D = D_m \cdot cn(u,k),$$
(7)

где $u = D_k \cdot (t - t_0) + F(\theta_0, k);$

$$\theta_0 = \arcsin\left(\frac{\sin(\lambda_0 - \lambda_L)}{k}\right)$$

5.2. При k>1 – дрейфующий режим, $D_m>D_k$. Для земного наблюдателя геостационар постоянно движется в одном направлении, с запада на восток или с востока на запад. Период изменения стробоскопической долготы определяется формулой

$$P = 57.29578 \cdot \frac{4 \cdot K(k_1)}{D_m}.$$
 (8)

Долготу λ и ее дрейф *D* на произвольный момент можно найти из выражений:

$$\sin(\lambda - \lambda_L) = sn(u, k_1)$$
$$\cos(\lambda - \lambda_L) = cn(u, k_1)$$
(9)

 $D = D_m \cdot dn(u, k_1)$ где $u = D_m \cdot (t - t_0) + F(\lambda_0 - \lambda_L, k_1)$.

В формулах (7, 9) через sn, cn, dn обозначены основные эллиптические функции Якоби. Для вычисления всех эллиптических функций и интегралов можно воспользоваться эффективными алгоритмами, изложенными в работах [12, 13].

В таблице 1 приведены амплитуды A(град)и периоды P(сутки) изменения стробоскопической долготы для либрационных и дрейфующих ГСС в зависимости от максимальной скорости дрейфа D_m в рамках модели (3) (см. формулы (6,8)). Предполагается круговое движение. Для дрейфующих ГСС в качестве амплитуды A дано максимальное отклонение от равномерного кругового движения с тем же периодом и нулевым наклоном.

Таблица 1 – Оценка резонансных возмущений для ГСС

Ли	брационн	ые	Дрейфующие			
<i>D</i> _{<i>m</i>} , ⁰ /сут <i>А</i> ,град <i>Р</i> ,сут			<i>D_m</i> , ⁰ /сут	А,град	Р,сут	
$\begin{array}{c} 0.001 \\ 0.076 \\ 0.219 \\ 0.335 \\ 0.411 \\ 0.437 \end{array}$	$\begin{array}{c} 0.01 \\ 10.0 \\ 30.0 \\ 50.0 \\ 70.0 \\ 90.0 \end{array}$	823 829 883 1014 1312	$\begin{array}{c} 0.45 \\ 0.60 \\ 0.80 \\ 1.00 \\ 2.00 \\ 10.00 \end{array}$	$\begin{array}{c} 25.00 \\ 5.50 \\ 2.50 \\ 1.50 \\ 0.40 \\ 0.02 \end{array}$	1450 720 490 380 182 36	

Основные отличия реального движения от математической модели (3) заключаются в следующем.

А) Формулы (6, 8) дают немного завышенный период изменения долготы, особенно для либрационных ГСС с небольшой амплитудой колебаний. Например, для $D_m = 0.001$ реальный полный период колебаний равен 745 суток, а не 823 (см. табл.1). Частично этот недостаток можно скомпенсировать вариацией параметра D_k в пределах от 0.480 до 0.437 °/сутки. Верхняя граница – для либрационных ГСС с небольшой амплитудой колебаний, нижняя – для объектов с максимальным дрейфом, близким к критическому значению 0.437 °/сутки. На рис.1 показана приближенная зависимость критического дрейфа D_k от максимального дрейфа D_m .





ISSN 1563-034X

В) Величины максимальных отклонений долготы либрационного ГСС к западу и востоку от устойчивых точек либрации несколько отличаются между собой, то есть колебания несимметричны. Здесь сказывается сравнительно слабое, но в данном случае заметное влияние высших долготных членов в разложении геопотенциала.

С) Действительные точки неустойчивого равновесия равны 161[°] и 348[°] восточной долготы, а не 165[°] и 345[°], как это следует из модели (3).

D) За счет переменного влияния лунно-солнечных возмущений глубина «потенциальной ямы» в устойчивых точках либрации и высота «потенциального барьера» в неустойчивых точках равновесия немного меняются со временем. Поэтому некоторые ГСС с максимальным дрейфом, близким к критическому значению 0.437 ⁰/ сутки, способны переходить из одной точки либрации в другую, либо временно менять режим движения с либрационного на дрейфующий и обратно.

Эволюция плоскости орбиты ГСС

Положение плоскости орбиты ГСС задается двумя параметрами: i – наклон плоскости орбиты к плоскости земного экватора и Ω – долгота восходящего узла орбиты, отсчитывается от точки весеннего равноденствия.

Как известно, если тело вращается и на него действуют внешние силы, то плоскость вращения этого тела медленно прецессирует вблизи некоторой основной плоскости. Например, экваториальная плоскость Земли под воздействием лунно-солнечных возмущений прецессирует с периодом около 26 000 лет, а основная плоскость это плоскость эклиптики, которая практически совпадает с неизменяемой плоскостью Лапласа для Солнечной системы. Плоскость орбиты пассивного ГСС также прецессирует, и здесь тоже есть своя «плоскость Лапласа». Для типичных ГСС период прецессии составляет 53.5 года [1, 10]. Плоскость Лапласа для ГСС проходит через точку весеннего равноденствия под некоторым углом Л к плоскости экватора. Для произвольного ГСС этот угол можно найти по формуле:

$$tg(2\Lambda) = \frac{\eta \cdot \sin(2\varepsilon)}{2 \cdot J_2 \cdot (2\pi \cdot n \cdot R/a)^2 + \eta \cdot \cos(2\varepsilon)},$$

где η =9.353·10⁻⁴ – безразмерная константа, которая зависит от параметров орбит Луны и

Солнца; ε =23.44⁰ – наклон экватора к эклиптике, J_2 – параметр геопотенциала (2-я зональная гармоника), R – экваториальный радиус Земли, a – большая полуось орбиты ГСС, n – среднее движение ГСС, выраженное в единицах «оборот/сутки». Для идеального ГСС a=42164 км, n=1.0027379093. Подставляя эти значения в последнюю формулу, получим: Λ =7.3⁰. Заметим, что для шарообразной Земли J_2 =0. Тогда Λ = ε , то есть в этом случае плоскость Лапласа для ГСС будет совпадать с плоскостью эклиптики, как и следовало ожидать.



Рисунок 2 – Эволюционная диаграмма «наклон-узел». Слева – по каталогам орбит в интервале 1991-2006 гг., справа – в интервале 2006-2016 гг. Крестиком отмечено положение плоскости Лапласа.

На рис.2 показаны две эволюционные диаграммы «наклон-узел» для ГСС в полярной системе координат [3, 11]. Эти диаграммы построены по большому количеству каталогов орбит ГСС на разные интервалы дат. По радиусу отложен угол наклона і орбиты к экватору, по полярному углу – долгота восходящего узла Ω . Каждая точка на диаграммах соответствует положению некоторой плоскости орбиты. Начало координат – это плоскость экватора ($i=0, \Omega$ неопределено). Крестиком на горизонтальной оси отмечено положение плоскости Лапласа для ГСС ($i=\Lambda=7.3^{\circ}$, $\Omega=0$). Время эволюции течет по часовой стрелке вдоль основной ветви диаграмм, начиная от точки (0,0). Для типичного ГСС полное время одного оборота по диаграмме равно 53.5 года.

Как видно из этого рисунка, для большинства ГСС наклон плоскости орбиты к плоскости Лапласа i_{Λ} почти постоянен. Можно также показать, что долгота восходящего узла Ω_{Λ} относительно этой плоскости зависит от времени почти по линейному закону [1, 2]. Следовательно, эти диаграммы указывают сразу на два инварианта: $i_{\Lambda}\approx$ const и $d\Omega_{\Lambda}/dt\approx$ const. Оба эти инварианта связаны с законом сохранения момента импульса.

В таблице 2 представлена теоретическая зависимость элементов i, Ω от времени T для либрационных ГСС. Предполагается, что в начальный момент T=0 круговая орбита ГСС лежит в плоскости экватора. Время T дано в годах, параметры i, Ω – в градусах.

Т	i	Ω	Т	i	Ω	Т	i	Ω
0	0.00		20	13.42	24	42	9.38	310
1	0.85	87	22	14.00	17	44	8.02	303
2	1.69	83	24	14.40	10	46	6.55	296
4	3.36	77	26	14.60	3	48	4.99	290
6	4.99	70	28	14.60	357	50	3.36	283
8	6.55	64	30	14.40	350	52	1.69	277
10	8.02	57	32	14.00	343	53	0.85	273
12	9.38	50	34	13.42	336	54	0.00	
14	10.62	44	36	12.65	330	55	0.85	87
16	11.72	37	38	11.72	323	56	1.69	83
18	12.65	30	40	10.62	316	58	3.36	77

Таблица 2 – Зависимость орбитальных параметров i, Ω от времени Т.

Экваториальные элементы (i, Ω) связаны с скости Лапласа $(i_{\Lambda}, \Omega_{\Lambda})$ известными формулами аналогичными элементами относительно пло- [14]:

 $\sin(i_{\Lambda}) \cdot \sin(\Omega_{\Lambda}) = \sin(i) \cdot \sin(\Omega)$,

 $\sin(i_{\Lambda}) \cdot \cos(\Omega_{\Lambda}) = \sin(i) \cdot \cos(\Lambda) \cdot \cos(\Omega) - \cos(i) \cdot \sin(\Lambda),$

 $\cos(i_{\Lambda}) = \cos(\Lambda) \cdot \cos(i) + \sin(\Lambda) \cdot \sin(i) \cdot \cos(\Omega),$

 $\sin(i) \cdot \cos(\Omega) = \sin(i_{\Lambda}) \cdot \cos(\Lambda) \cdot \cos(\Omega_{\Lambda}) + \cos(i_{\Lambda}) \cdot \sin(\Lambda),$

 $\cos(i) = \cos(\Lambda) \cdot \cos(i_{\Lambda}) - \sin(\Lambda) \cdot \sin(i_{\Lambda}) \cdot \cos(\Omega_{\Lambda}).$



Рисунок 3 – Зависимость і (Т) для неуправляемых ГСС. Сплошная линия – теоретическая кривая, точки – экспериментальные данные для двух типичных ГСС: Kosmos-1700 (запуск 1985 г., интервал 1991-2016 гг.) и спутник

серии DSP (запуск 1971 г., интервал 1991-2007 гг.).

На рис. 3 показана типичная зависимость наклона *i* от времени *T*, в соответствии с табл.2 и рис.2. Сплошная линия – теоретическая зависимость. Точками обозначены экспериментальные данные для двух либрационных ГСС, находящихся на разных стадиях эволюции. Из графика следует, что в интервале угла наклона 0-10⁰ сам угол меняется со скоростью около 8"/сутки. Более полную теорию движения ГСС можно найти в работе [10].

Литература

1. Сочилина А.С., Вершков А.Н., Григорьев К.В., Киладзе Р.И., Гаязов И.С. Каталог улучшенных орбит неуправляемых геостационарных объектов. – СПб.: ИТА РАН, 1994. – Т.1. – 102 с.; – Т.2. – 95 с.

2. Сочилина А.С., Киладзе Р.И., Григорьев К.В., Вершков А.Н. Каталог орбит геостационарных спутников. – СПб.: ИТА РАН, 199. – 104 с.

3. Диденко А.В., Демченко Б.И., Усольцева Л.А., Афонин А.Н., Калюжный Е.А., Гордыгага Н.Н., Старожилов Н.И., Зикрань В.А., Есенгали С.Р., Кабенко Ф.Х. Зональный каталог геостационарных спутников. Вып.2. – Алматы: Гылым, 2000. – 108 с.

4. Evidence for historical satellite fragmentations in and near the geosynchronous regime. Proceedings of the Third European Conference on Space Debris, 19 - 21 March 2001, Darmstadt.

5. http://www.planet4589.org/space/log/geo.log

6. http://celectrak.com/NORAD/elements/geo.txt

7. http://spacedata.vimpel.ru/ru

8. Жаров В.Е. Сферическая астрономия. Фрязино, 2006. – 480 с.

9. Абалакин В.К., Аксенов Е.П., Гребенников Е.Д., Дёмин В.Г., Рябов Ю.А. Справочное руководство по небесной механике и астродинамике / под ред. Дубошина Г.Н. – М.: Наука, 1976. – 864 с.

10. Киладзе Р.И., Сочилина А.С. Теория движения геостационарных спутников. - СПб., 2008. - 132 с.

11. Демченко Б.И., Воропаев В.А., Комаров А.А., Молотов И.Е., Серебрянский А.В., Усольцева Л.А. Некоторые характеристики множества геостационарных спутников // Известия НАН РК. Сер. физ.-мат. – 2016. – № 5. – С.64-75.

12. Справочник по специальным функциям /под ред. М. Абрамовица и И. Стиган. – М.: Наука, 1979. – 832 с.

13. Агеев М.И., Алик В.П., Марков И Ю. Библиотека алгоритмов 151Б-200Б. Вып.4. – М.: Радио и связь, 1981. – 184 с. 14. Субботин М.Ф. Введение в теоретическую астрономию. – М., Наука, 1968. – 800 с.

References

1. A.S. Sochilina, A.N. Vershkov, K.V. Grigoriev, R.I. Kiladze, and I.S. Gayazov Catalog of improved orbits of uncontrolled geostationary objects, (St. Petersburg: ITA RAS, 1994), vol.1, 102 p.; vol.2, 95 p. (in Russ).

2. A.S. Sochilina, R.I. Kiladze, K.V. Grigoriev, and A.N. Vershkov, Catalog of the orbits of geostationary satellites, (St. Petersburg: ITA RAS, 1996), 104 p. (in Russ).

3. A.V. Didenko, B.I. Demchenko, L.A. Usoltseva, A.N. Afonin, E.A. Kalyuzhny, N.N. Gordygaga, N.I. Starogilov, V.A. Zikran, C.R. Esengali, and F.Kh. Kabenko, Zonal catalog of geostationary satellites, Issue 2, (Almaty: Gylym, 2000), 108 p. (in Russ).

4. Evidence for historical satellite fragmentations in and near the geosynchronous regime, Proceedings of the 3rd European Conf. on Space Debris, 19-21 March 2001, Darmstadt.

5. http://www.planet4589.org/space/log/geo.log

6. http://celectrak.com/NORAD/elements/geo.txt

7. http://spacedata.vimpel.ru/ru

8. V.Ye. Zharov, Spherical astronomy. (Fryazino, 2006), 480 p. (in Russ).

9. V.K Abalakin., E.P. Aksenov, E.D. Grebennikov, V.G. Demin, and Yu.A. Ryabov Reference guide to celestial mechanics and astrodynamics / edited by Duboshin G.N. (Moscow: Science, 1976), 864 p. (in Russ).

10. R.I. Kiladze and A.S. Sochilina The theory of motion of geostationary satellites, (St. Petersburg, 2008), 132 p. (in Russ).

11. B.I. Demchenko, V.A. Voropaev, A.A. Komarov, I.E. Molotov, A.V. Serebryanskiy, and L.A. Usoltseva, Izvestiya NAS RK. Ser. fiz.-mat. 5, 64-75, (2016). (in Russ).

12. Handbook of special functions / edited by M. Abramovits and I. Stigan, (Moscow: Science, 1979), 832 p. (in Russ).

13. M.I. Ageev, V.P. Alik, and I.Yu. Markov Library of Algorithms 151B-200B. Issue 4, (Moscow: Radio and Communication, 1981), 184 p. (in Russ).

14. M.F. Subbotin Introduction to theoretical astronomy, (Moscow: Science, 1968), 800 p. (in Russ.).

МРНТИ 58.31.33

Абишев М.Е., Нуршаева Ф.С.*

Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Казахстан, Алматы, *e-mail: for-fari@mail.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ КОРОТКОЖИВУЩИХ РАДИОНУКЛИДОВ ДЛЯ ДИАГНОСТИКИ ОНКОЛОГИЧЕСКИХ ЗАБОЛЕВАНИЙ НА ОСНОВЕ ПРАКТИКИ В КАЗНИИ ОНКОЛОГИИ И РАДИОЛОГИИ

В работе по критериям выбора радионуклида были выбраны короткоживущие радионуклиды для позитронно-эмиссионной томографии (ПЭТ), однофотонной эмиссионной компьютерной томографии (ОФЭКТ) и для современных методов диагностики ПЭТ/КТ (компьютерная томография) и ОФЭКТ/КТ. Для каждого метода диагностики были определены радиоизотопы, тип распада, виды излучений, ядерные реакций и энергий распада. Для ОФЭКТ были произведены расчеты по практическому выходу ^{99m}Tc из генератора в течение срока эксплуатации с 20.10 по 3.11.2016 года (15 суток) в сравнении с теоретической (по расчету) радиоактивностью. Были посчитаны объем и дозы элюата предварительно разбавленных физраствором для исследования определенных органов и систем. А для ПЭТ были рассмотрены короткоживущие радионуклиды, такие как ¹¹C, ¹³N, ¹⁵O, ¹⁸F, ⁸²Rb. Проведены сравнения практических результатов с теоретическими расчетами. Также были определены некоторые радиологические параметы радионуклидов, широко применяемые в радионуклидной диагностике. Они представлены в основной части статьи. Радионуклидная диагностика, благодаря ее высокой эффективности, стала незаменимой частью клинической практики в развитых странах. Использование таких радиофармпрепаратов (РФП) позволяет проводить диагностику различных заболеваний на ранних стадиях. Для решения этой проблемы и преодоления зависимости от импорта Институт ядерной физики НЯЦ РК на протяжении ряда последних лет проводит разработку технологий получения важнейших медицинских изотопов и радиофармпрепаратов, таких как Натрия пертехнетат ^{99m}Tc, Натрия йодид ¹³¹I, Натрия о-йодгиппурат ¹³¹I, Таллия хлорид ²⁰¹T1 и другие. В работе были проведены расчеты энергии распада и рассмотрены методы регистрации излучений.

Ключевые слова: диагностика, радиофармпрепараты, изотопы, энергия, доза.

Abishev M.E., Nurshayeva F.S.* Al-Farabi Kazakh National university, Kazakhstan, Almaty, *e-mail: for-fari@mail.ru

The investigation of short-lived radionuclides for diagnosis of oncological diseases on the basis of practice in KazNRI of oncology and radiology

In the work on the criteria for selecting a radionuclide, short-lived radionuclides for PET, SPECT and for modern diagnostic methods for PET / CT and SPECT / CT were chosen. For each diagnostic method, radioisotopes, the type of decay, types of radiation, nuclear reactions, and decay energies were determined. For SPECT, calculations were carried out for the practical output of 99mTc from the generator during the lifetime from 20.10 to 3.11.2016 (15 days) in comparison with the theoretical (calculated) radioactivity. The volume and doses of the eluate preliminarily diluted with saline for the study of certain organs and systems were calculated. And for PET, short-lived radionuclides such as 11C, 13N, 15O, 18F, 82Rb were considered. Comparison of practical results with theoretical calculations is carried out. Some radiological parameters of radionuclides, widely used in radionuclide diagnostics, were also determined. They are presented in the main part of the article. Radionuclide diagnostics, thanks to its high efficiency, has become an indispensable part of clinical practice in developed countries. The use of such radiophar-

maceuticals makes it possible to diagnose various diseases at early stages. To solve this problem and overcome dependence on imports, the Institute of Nuclear Physics of the NNC RK has been developing technologies for obtaining the most important medical isotopes and radiopharmaceuticals, such as sodium pertechnetate 99mTc, sodium iodide 1311, sodium o-iodophipate 1311, thallium chloride 201T1 and others . In the work, calculations of the decay energy were carried out and methods for registering the emissions were considered.

Key words: diagnostics, radiopharmaceuticals, isotopes, energy, dose.

Абишев М.Е., Нұршаева Ф.С.* Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Қазақстан, Алматы, *e-mail: for-fari@mail.ru

Онкологиялық аурулар диагностикасындағы қысқа ғұмырлы радионуклидтерді онкология және радиология ҚазҰЗИ-да практикалық қолданыс негізінде зерттеу

Жұмыста радионуклидтерді таңдау критерийлері бойынша ПЭТ, БФЭКТ және диагностиканың заманауи әдістері ПЭТ/КТ және БФЭКТ/КТ-ға тән радионуклидтер таңдалынды. Диагностиканың әрбір түріне радиоизотоптар, ыдырау типі, сәулелену түрі, ядролық реакция және ыдырау энергиясы анықталынды. Мысалы БФЭКТ үшін 20.10-дан 3.11.2016 жылға дейін (15 тәулік) эксплуатация мерзімі бойынша ^{99т}Тс генератордан практикалықшығуын теоретикалықпен салыстырдық. Органдар мен жүйелерді диагностикалауға қажет, алдын-ала физраствормен араластырылған элюаттың көлемі мен дозасы есептелінді. Ал, ПЭТ үшін ¹¹С, ¹³N, ¹⁵O, ¹⁸F, ⁸²Rb секілді қысқа ғұмырлы радионуклидтер қарастырылды. Практикалық нәтижелер мен теориялық мәндерді салыстырдық. Сонымен қатар радионуклидті диагностикада кеңінен қолданылатын радионуклидтердің кейбір радиологиялық параметрлері қарастырылды. Олар статьяның негізгі бөлімінде көрсетілді. Радионуклидті диагностика өзінің эффектифтілінің арқасында барлық дамыған елдерде клиникалық практиканың таптырмайтын бөлігіне айналды. Мұндай радионуктерді қолдану әртүрлі аурулардың ең бастапқы сатысында да оларға диагностика жасауға мүмкіндік береді. Бұл мәселені шешу үшін және импорттан тәуелділікті жеңу мақсатында Қазақстан Республикасы ҰЯЦ ЯФИ соңғы жылдары 99m Тс натрий пертехнетаты, 131 натрий йодиді, ¹³¹I натрий о-йодгиппураты, ²⁰¹T1 таллий хлориді секілді өте маңызды медициналық изотоптар мен радиофармпрепараттарды дайындауда. Жұмыста ыдырау энергиясы мен сәулеленуді тіркеу әдістері қарастырылды.

Түйін сөздер: диагностика, радиофармпрепараттар, изотоптар, энергия, доза.

Введение

Радионуклидная диагностика – один из современных методов лучевой диагностики для оценки функционального состояния различных органов и систем организма с помощью диагностических радиофармпрепаратов, меченных радионуклидами. В настоящее время из методов радионуклидной диагностики наиболее широкое распространение получила сцинтиграфия метод функциональной визуализации, заключающийся во введении в организм радиоактивных изотопов и получении изображения путём определения испускаемого ими излучения. Казахский НИИ онкологии и радиологии является ведущим центром по оказанию диагностической и лечебной помощи онкологическим больным в Республике Казахстан. Большая часть онкологических заболеваний, встречающихся в Казахстане, может быть диагностирована на ранних стадиях (опухоли молочной железы, кожи, шейки матки, пищевода, желудка, печени, ободочной

и прямой кишки, предстательной железы) путем проведения радионуклидной диагностики. Своевременная и ранняя диагностика онкологических заболеваний позволяет значительно улучшить исходы лечения и повысить выживаемость больных. Так, выявление рака молочной железы на I стадии позволяет более чем в 200 раз сократить финансовые расходы на лечение и повысить 5-летнюю выживаемость почти вдвое (до 90-95%).

Критерии выбора радионуклида

Современное развитие ядерной медицины характеризуется прежде всего разработкой уникальных новых радиофармпрепаратов, которые позволяют оценивать состояние различных органов и тканей организма на клеточном уровне.

 Оптимальным нуклидом для радиофармпрепарата является тот, который позволяет получить максимум диагностической информации при минимальной лучевой нагрузке на больного. Желательно выбирать такой РФП, который быстро поступает в исследуемый орган и быстро выводится из организма, тем самым снижая лучевую нагрузку.

- По физическим характеристикам он должен обладать коротким периодом полураспада. Быстрый распад нуклида также обеспечивает безопасность исследования.

- К числу основных требований следует отнести наличие у нуклида γ-излучения; удобного для наружной регистрации.

- РФП, вводимые внутрь организма, не должны содержать токсических примесей или радиоактивных веществ, которые в процессе распада образуют долгоживущие дочерние нуклиды.

Из элюата можно набрать 5 мл, где будет 1038,8 \cdot 5= 5194 Мбк и метить, добавив во флакон с реагентом, например, для сцинтиграфии скелета Технефор. ^{99m}Т-технефор вводится внутривенно в зависимости от веса пациента 400-600 Мбк и сцинтиграфия всего тела (скелета) через 3 часа. Если гамма-камера одна, за эти три часа можно исследовать почки, печень, щитовидную железу. Для исследования функции (динамической сцинтиграфии) почек 1 мл – 1038,8 МБк элюата предварительно разбавив физраствором до 4-5 мл добавляют во флакон с Пентатехом. В среднем на пациента внутривенно вводится 200 МБк, т. е. препарат хватает на 5 больных. Для статической сцинтиграфии печени с ^{99m}T-технефитом или динамической – гепатобилисцинтиграфии с ^{99m}T-мезидой применяется такая же доза препаратов.

Радиоактивность элюата высока (в первой недели особенно). В таблице 1 приведен практический выход ^{99m}Tc из генератора ежедневно в течение срока эксплуатации (15 суток) в сравнении с теоретической (по расчету) радиоактивностью. Элюат постоянно должен находиться в защитном контейнере и при работе должны соблюдаться все правила радиационной безопасности.

Таблица 1 – Практический выход ^{99m}Tc из генератора ежедневно в течение срока эксплуатации (15 суток) в сравнении с теоретической (по расчету) радиоактивностью

Nº	Дата	Время	Объем в мл	Практически выход радио-активности в МБк	Удельная МБк/мл	Теоретическая активность на 9 ⁰⁰
1	20.10	10 <u>10</u>	7,5	17090	2278,7	17900
2	21.10	12 <u>50</u>	8,0	13830	1728,8	13912
3	22.10	13 <u>35</u>	8,5	10320	1214,1	10813
4	23.10	9 <u>40</u>	8,5	8830	1038,8	8405
5	24.10		Dravon			6264
6	25.10		Выход	ные		4868
7	26.10	1000	8,5	4881	574,2	3784
8	27.10	9 <u>40</u>	8,0	2134	226,8	2941
9	28.10	1100	8,5	2326	273,6	2286
10	29.10	9 <u>40</u>	8,5	1698	199,8	1777
11	30.10	9 <u>40</u>	8,5	1378	162,1	1381
12	31.10		Dravor			1073
13	1.11		Быход		834	
14	2.11	9 <u>40</u>	8,5	849	99,9	648
15	3.11	8 <u>40</u>	8,5	635	74,7	

Распад нуклида (таблица 2, 3) наступает, когда в ядре нет равновесия между протонами и нейтронами. Когда в нуклиде избыток протона наступает позитронный β⁺ распад или К-захват, в результате протон превращается в нейтрон. Когда в нуклиде избыток нейтронов наступает электронный β⁻ распад, в результате нейтрон превращается в протон. Тяжелые неустойчивые нуклиды, распадаясь, испускают электроны, легкие – позитроны или испытывают К-захват (таблица 4).

Время распада t в часах	<i>t_x</i> %	МБк	МБк/мл	Время
0	100	2000	400	8,00
1	89.09	1781,797	356	9,00
2	79,37	1587,401	317	10,00
3	70.71	1414,214	283	11,00
4	63,0	1259,921	252	12,00
5	56,12	1122,462	224	13,00
6	50,00	1000	200	14,00
7	44,54	890,8987	178	15,00
8	38,69	793,7005	159	16,00

Таблица 2 – Распад ⁹⁹мТс (5 мл) Т₁₂=6,01ч

0 часов --- N МБк N МБк ---- 100% х= t(%) · N МБк : 100% = х МБк t часов х МБк х МБк ---- t часов(%)

Таблица 3 – Распад ¹³¹I

Сутки	%	Сутки	%	Сутки	%
1	91,8	9	46,3	17	23,4
2	84,3	10	42,5	18	21,0
3	77,4	11	39,0	19	19,7
4	71,0	12	35,8	20	18,1
5	65,2	13	32,9	21	16,6
6	59,9	14	30,9	22	15,2
7	55,7	15	27,7	23	14,0
8	51,2	16	25,4		

Таблица 4 – Некоторые радиологические параметры радионуклидов, широко применяемые в радионуклидной диагностике

Радио-	Тип	Вид	Зид МэВ		Выход	Стабильный		
нуклиды	распада	излучения	1 _{1/2}	Ερ	Εγ	Eg	элем.	
			Циклотронные	е радионуклиды	[
⁶⁷ Ga			3,24 суток	-	0,93*	40	⁶⁷ Zn	
²⁰¹ Tl			3,08 суток	-	0,167*	8		
¹¹¹ In	22		2,81 суток	-	0,173*	89		
^{123}I	33		13,3 часа	-	0,159*	84		
¹⁸ F	33	h	1,83 часа	0,64	0,511	100	¹⁸ O	
¹¹ C	دت دد	93 b	20,5 минут	0,96	0,511	100	^{11}B	
^{13}N	b		10,2 минут	1,19	0,511	100	¹³ C	
¹⁵ O			2,05 минут	1,72	0,511	100	¹⁵ N	
⁶⁸ Ga			68,3 минут	1,89	0,511	100	⁶⁸ Zn	
⁸² Rb			1,3 минут	3,35	0,511	100	⁸² Kr	
Реакторные радионуклиды								
¹³¹ I	ЭЗ		8,06 суток	-	0,364*	82.4	¹³¹ Xe	
^{99m} Tc	ЭЗ	g	6,02 часов	-	0,14*	02,4	⁹⁹ Tc	
^{113m} In	ЭЗ		99,8 минут	-	0,39*	00,3	¹¹³ In	

Примечания – Еү* радионуклидами с такой энергией гамма-излучения исследования проводятся на гамма-камере (ОФЭКТ-сканер), а с остальными с Еү=0,511 МэВ – на ПЭТ-сканере, Ер – энергия позитрона. Выделены жирным шрифтом радионуклиды жизненно важных элементов

Помимо компактных генераторов ^{99m}Tc бывают стационарные экстракционные генераторы, позволяющие снизить себестоимость элюата в 3-5 раз. Производительность такой установки высока и составляют 555-740 ГБк (15-20 Кюри)

Расчет радиоактивности A(t) производится следующим образом:

 $A(t)=A_0\cdot e^{\lambda t},$

где A_0 – начальная активность при $t = 0, \lambda$ – постоянная распада, $\lambda T_{1/2} = \ln 2 = 0,693$. Следовательно

$$A(t) = A_0 \cdot e^{-0.693t/T1/2}.$$

Выводы

В работе исследованы современные методы диагностики онкозаболеваний на основе практики применения их в КазНИИ онкологии и радиологии, такие как ОЭФКТ и ПЭТ. Для таких видов диагностики были определены наиболее оптимальные радионуклиды: ^{99m}Tc, ¹²⁵I, ^{133м}In для ОЭФКТ и изотопы для позитронной томографии: углерод-11, ¹¹C, T = 20,4 мин.; азот-13, ¹³N, T = 10,0 мин.; кислород-15, ¹⁵O, T = 2,1 мин.; фтор-18, ¹⁸F, *T* = 109 мин.; рубидий-82, ⁸²Rb, *T* = 1,25 мин. Определены типы распадов и виды излучений, также посчитаны энергии распадов для каждого нуклида. Проведены расчеты радиоактивности и дозы препаратовю Показано, что будет оптимальная выход (5194 Мбк), если из элюата набрать 5 мл. Если ^{99m}Т-технефор вводится внутривенно, для исследования функции почек достаточно 1 мл – 1038,8 МБк элюата, предварительно разбавленного физраствором до 4-5 мл с добавлением во флакон Пентатеха. Так как в среднем на пациента внутривенно вводится 200 МБк, препарата хватает на 5 больных. Для статической сцинтиграфии печени с 99mT-технефитом или динамической гепатобилисцинтиграфии с ^{99т}Т-мезидой можно применять такую же дозу препаратов.

Литература

1. Викман Я.З. Комплексная радионуклидная диагностика отдаленных метастазов рака щитовидной железы: Дис. канд. мед. наук. – Вильнюс, 1989. – 119 с.

2. Габуния Р.И., Кузьмин В.П., Фатеева М.Н. и соавт. Применение радиоактивных нуклидов в клинических исследованиях. – М.: Атомиздат, 2000. – 263 с.

3. Глейзер Ю.Я., Даваян Э.А. Радиоизотопная диагностика опухолей скелета // Мед. радиология. – 1971. – №1. – С. 79-85.

4. Cynthia C. Chernecky and Barbara J. Berger. Laboratory Tests and Diagnostic Procedures. – Elsevier, St. Louis, 2012. – 1222 p.

5. Wernick M. and Arsvold J. Emission tomography: the fundamentals of PET and SPECT. - Elsevier: Academic Press, 2004.

6. Schneebaum S., Even-Sapir E. and Cohen M. Clinical applications of gamma-detection probes-radioguided surgery // Eur. J. Nucl. Med. - 1999. - Vol. 26(1). -P.26-35.

7. Zinnhardt B., Pigeon H., Theze B., Viel T., Wachsmuth L., Fricke I.B., et al. Combined PET imaging of the inflammatory tumor microenvironment identifies margins of unique radiotracer uptake. // Cancer Res. – 2017. – Vol.77. – P.1831–41.

8. Berdnikova A.K., Dubinin F.A., Kantserov V.A., Orlov A.D., Pereyma D.U., Shmurak S.Z. and Zhukov K.I. Miniature gamma detector based on inorganic scintillator and SiPM // J. Phys.: Conf. Ser. 2016. – Vol. 675. – P.675 042047.

9. Berdnikova A.K., Bolozdynya A.I., Kantserov V.A., Kondakov A.K., Pashkovich I. and Znamenskiy I.A. A method for lateral localization of a compact gamma source in radionuclide diagnostics // J. of Physics: Conf. Series. – 2016. – Vol.798. – N. 1. – P.675 042048.

10. Bucerius J., Ahmadzadehfar H. and Biersack H. 99mTc-Sestamibi Clinical applications. Germany: Springer; 2011. ISBN: 978-3-642-04232-4.

11. Fan Z., Calsolaro V., Atkinson R.A., Femminella G.D., Waldman A., Buckley C., et al. Flutriciclamide (18F-GE180) PET: first-in-human PET study of novel third-generation in vivo marker of human translocator protein // J Nucl Med. – 2016. – P.57:1753-11.

12. Feeney C., Scott G., Raffel J., Roberts S., Coello C., Jolly A., et al. Kinetic analysis of the translocator protein positron emission tomography ligand [18F]GE-180 in the human brain // Eur J Nucl Med Mol Imaging. – 2016. – P.43:2201-12.

13. Boutin H., Murray K., Pradillo J., Maroy R., Smigova A., Gerhard A., et al. 18F-GE-180: a novel TSPO radiotracer compared to 11C-RPK11195 in a preclinical model of stroke // Eur J Nucl Med Mol Imaging. – 2015. – P.42:503-13.

14. Sridharan S., Lepelletier F.X., Trigg W., Banister S., Reekie T., Kassiou M., et al. Comparative evaluation of three TSPO PET radiotracers in a LPS-induced model of mild neuroinflammation in rats. // Mol Imaging Biol. – 2017. – P.1977–89.

15. James M.L., Belichenko N.P., Shuhendler A.J., Hoehne A., Andrews L.E., Condon C., et al. [18F]GE-180 PET detects reduced microglia activation after LM11A-31 therapy in a mouse model of Alzheimer's disease // Theranostics. – 2017. – P.7: 1422–36.

16. Winkeler A., Boisgard R., Awde A.R., Dubois A., Theze B., Zheng J., et al. The translocator protein ligand [18F]DPA-714 images glioma and activated microglia in vivo // Eur J Nucl Med Mol Imaging. – 2012. – P.39: 811–23.

17. Buck J.R., McKinley E.T., Fu A., Abel T.W., Thompson R.C., Chambless L., et al. Preclinical TSPO ligand PET to visualize human glioma xenotransplants: a preliminary study // PLoS One. – 2015. – 10:e0141659.

18. Su Z., Roncaroli F., Durrenberger P.F., Coope D.J., Karabatsou K., Hinz R., et al. The 18-kDa mitochondrial translocator protein in human gliomas: an 11C-(R)PK11195 PET imaging and neuropathology study // J Nucl Med. – 2015 – P. 56:512–7.

19. Langen K.J., Galldiks N., Hattingen E., Shah N.J. Advances in neurooncology imaging // Nat Rev Neurol. - 2017. - P.13:279-89.

20. Jensen P., Feng .L, Law I., Svarer C., Knudsen G.M., Mikkelsen J.D., et al. TSPO imaging in glioblastoma multiforme: a direct comparison between 123I-CLINDE SPECT, 18F-FET PET, and gadolinium-enhanced MR imaging // J Nucl Med. – 2015. – P.56: 1386–90.

References

1. Ya.Z. Wikman, Complex radionuclide diagnostics of distant metastases of a thyroid gland cancer: Dis. kand. med. sciences. – Vilnius, 119 s. (1989). (in russ).

2. R.I. Gabunia, V.P. Kuzmin, M.N. Fateeva, et al. The use of radioactive nuclides in clinical studies. (Moscow: Atomizdat, 2000), 263 p. (in russ).

3. Yu.Ya. Glazer and E.A. Davyan, Med. Radiology, 1, 79-85, (1971). (in russ).

4. C. Cynthia Chernecky and J. Berger Barbara. Laboratory Tests and Diagnostic Procedures (Elsevier, St. Louis, 2012), 1222 p.

5. M. Wernick and J Arsvold Emission tomography: the fundamentals of PET and SPECT (Elsevier: Academic Press, 2004).

6. S. Schneebaum, E. Even-Sapir and M. Cohen, Eur. J. Nucl. Med., 26 (1), 26-35, (1999).

7. B. Zinnhardt, H. Pigeon, B. Theze, T. Viel, L. Wachsmuth, I.B. Fricke, et al, Cancer Res. 77, 1831-41, (2017).

8. A.K. Berdnikova, F.A. Dubinin, V.A. Kantserov, A.D. Orlov, D.U. Pereyma, S.Z. Shmurak, and K.I. Zhukov, J. Phys.: Conf. Ser. 675, 675 042047, (2016).

9. A.K. Berdnikova, A.I. Bolozdynya, V.A. Kantserov, A.K. Kondakov, I. Pashkovich, and I.A. Znamenskiy, Journal of Physics: Conference Series. 798, 1, 675 042048, (2016).

10. J. Bucerius, H. Ahmadzadehfar, and H. Biersack 99mTc-Sestamibi Clinical applications. (Germany: Springer; 2011). ISBN: 978-3-642-04232-4.

11. Z. Fan, V. Calsolaro, R.A. Atkinson, G.D. Femminella, A. Waldman, C. Buckley, et al. J Nucl Med. 57, 1753-11, (2016).

12. C. Feeney, G. Scott, J. Raffel, S. Roberts, C. Coello, A. Jolly, et al. Eur J Nucl Med Mol Imaging, 43, 2201-12, (2016).

13. H. Boutin, K. Murray, J. Pradillo, R. Maroy, A. Smigova, A. Gerhard, et al. Eur J Nucl Med Mol Imaging, 42, 503-13, (2015).

S. Sridharan, F.X. Lepelletier, W. Trigg, S. Banister, T. Reekie, M. Kassiou, et al. Mol Imaging Biol. 1977–89, (2017).
 M.L. James, N.P. Belichenko, A.J. Shuhendler, A. Hoehne, L.E. Andrews, C. Condon, et al. Theranostics, 7, 1422–36, (2017).

16. A. Winkeler, R. Boisgard, A.R. Awde, A. Dubois, B. Theze, J. Zheng, et al. Eur J Nucl Med Mol Imaging, 39, 811–23, (2012).

17. J.R. Buck, E.T. McKinley, A. Fu, T.W. Abel, R.C. Thompson, L. Chambless, et al. PLoS One, 10, 0141659, (2015).

18. Z. Su, F. Roncaroli, P.F. Durrenberger, D.J. Coope, K. Karabatsou, R. Hinz, et al. J Nucl Med. 56, 512-7, (2015).

19. K.J. Langen, N. Galldiks, E. Hattingen, N.J. Shah, Nat Rev Neurol., 13, 279-89, (2017).

20. P. Jensen, L. Feng, I. Law, C. Svarer, G.M. Knudsen, J.D. Mikkelsen, et al., J Nucl Med., 56, 1386-90, (2015).
FTAMP 27.35.57

Тасмұрат А.З.¹, Бекбаев А.К.^{1*}, Азнабаев Д.Т.²

¹Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Қазақстан, Алматы ²Ядролық зерттеулердің біріккен институты, Ресей, Дубна ^{*}e-mail: akbekbaev@gmail.com

H_2^+, HD^+, D_2^+ СУТЕГІ МОЛЕКУЛАЛЫҚ ИОНДАР

Бұл жұмыста H_2^+, HD^+, D_2^+ молекулалық иондарының статистикалық поляризациясы есептелген, соның ішінде релятивистік емес жақындатуында DC Штарк эффектісі (тұрақты электр өрісінде) есептелген. Біздің есептеулер айналмалы-тербелмелі күйлер тәуелділігімен қоса деңгейлердің аса нәзік ыдырауының тәуелділігін ескереді. Бұрыштық момент алгебрасымен байланысты аналитикалық шешімдер қабылдай алатын жеке жағдайлар қарастырылды.

Жұмыс нәтижелері метрологияда үлкен маңызы бар. Біріншіден, іргелі физикалық тұрақтыларды айқындауға, бірінші кезекте протон массасының электрон массасына қатынасын m_p/m_e жақсарту. Статикалық поляризациялану мәндерін аса дәл есептеу, іргелі тұрақтыларды тексеру вариацияларын лаборатория шарттары уақытында тәжірибелерде аса маңызды. Жуырда сутегі молекулалық ионын H_2^+ және HD^+ аса дәл сағаттарды бөлме температурасында салыстырмалы тиянақтылықпен 10⁻¹⁸ іске асыруда. Салыстыру үшін ең жақсы дәлдік цезиден жасалған сағаттарда (қазіргі уақыт үлгісі), 2011 жылы АҚШ Ұлттық стандарттар және технологиялар институтында іске асырылды: 2.3*10⁻¹⁶.

Түйін сөздер: молекулалық ион, спектроскопия, Шредингер теңдеуі.

Tasmurat A.Z.¹, Bekbaev A.K.^{1*}, Aznabayev D.T.¹ ¹Al-Farabi Kazakh National university, Kazakhstan, Almaty ²Joint Institute for Nuclear Research, Russia, Dubna *e-mail: akbekbaev@gmail.com H⁺₂, HD⁺, D⁺₂ hydrogen molecular ions

The article is devoted to the study of statistical polarizability of molecular ions H_2^+, HD^+, D_2^+ . Particularly DC Stark effect (at constant electric field) in the nonrelativistic approximation was calculated. Our calculation takes into account the dependence of the rotational-vibrational states, and the dependence of the hyperfine splitting of levels. We have considered special cases that allow obtain explicit analytical solutions associated with the algebra of angular momentum.

The results of the work have a great importance in metrology. At first to clarify the fundamental physical constants, primarily to improve the value of the mass ratio of the electron to the proton m_p/m_e . Precise calculations of the values of static polarizabilities will be of a great importance for verification experiments of variations of fundamental constants in time in a laboratory. Recently has been proposed to use molecular hydrogen ions H_2^+ and HD^+ for development of high-precision clock with a relative stability of order of 10^{-18} at room temperature. For comparison, the best accuracy achieved in cesium clocks (the current standard time) implemented by the National Institute of Standards and Technology in 2011: 2.3 * 10^{-16} .

Key words: Molecular hydrogen ion, spectroscopy, Schrodinger equation.

Тасмурат А.З.¹, Бекбаев А.К.^{1*}, Азнабаев Д.Т.² ¹Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Казахстан, Алматы ²Объединенный институт ядерных исследований, Россия, Дубна *e-mail: akbekbaev@gmail.com

Молекулярные ионы водорода H_2^+ , HD^+ , D_2^+

В данной работе изучена статистическая поляризуемость молекулярных ионов водорода H_2^+, HD^+, D_2^+ , в частности, рассчитан DC Штарк эффект (при постоянном электрическом поле) в нерелятивистском приближении. Наш расчет учитывает как зависимость от вращательно-колебательных состояний, так и зависимость от сверхтонкого расщепления уровней. Нами рассмотрены частные случаи, которые позволяют получать явные аналитические решения, связанные с алгеброй углового момента.

Результаты работы имеют большое значение в метрологии. Во-первых для уточнения фундаментальных физических констант, в первую очередь для улучшения значения отношения массы электрона к протону, m_p/m_e . Сверхточные расчеты значений статической поляризуемостей будут иметь огромное значение для экспериментов по проверке вариации фундаментальных констант во времени в лабораторных условиях. Недавно было предложено использовать молекулярные ионы водорода H_2^+ и HD^+ для реализации сверхточных часов с относительной стабильностью порядка 10^{-18} при комнатной температуре. Для сравнения наилучшая точность, достигнутая в цезиевых часах (нынешний стандарт времени), реализованных в Национальном институте стандартов и технологии США в 2011 году: $2.3*10^{-16}$.

Ключевые слова: молекулярный ион водорода, спектроскопия, уравнение Шредингера.

Кіріспе

Соңғы көрсетулер [1] бойынша, қарапайым молекулалық ионын тұрақтылығы жоғары оптикалық сағаттар үшін қолдану мүмкіндігі ие болуда. Осындай сағаттардың жоғарғы дәлділігі үшін жалпы тәжірибе жүзінде молекулалық реакция ішкі өрісте пайда болатынын білу кажет. Сутегі молекулалық ионы үшін қарапайым үш дене жүйесі ретінде осы мәліметтер өте жоғарғы дәлділікпен қатаң түрде алынуы мумкін. Сегізден жоғары санға ие ро-вибрационды жағдайдың релятивисттік емес полярлылығы қазіргі таңда құрылымның кең бөлігі үшін қолайлы [2-5]. Полярлылықтағы релятивисттік көрсетулер салыстырмалы $O(\alpha^2)$ ретіне жатады немесе 10-4 салыстырмалы дәлділікпен өлшеуде мүмкіндік туғызады [6].

Сонымен қатар, спекроскопиялық ровибрационды өткелді пайданала отырып протон массасының электрон массасына жақсы қатынасын алу мақсатында көптеген тәжірибелер жүргізілген [7-8] және аса нәзік құрылымды сутегі молекулалық ионының жағдайын зерттеу маңызды рөл атқаруда[9-10]. Ро-вибрационды өткел үшін теорияның қазіргі жағдайы сутегі молекулалық ионындағы негізгі өткелдер үшін ~7×10⁻¹²-ның белгісіз бөлігі болып табылады [11] және аса нәзік құрылымға дәл жету үшін 1ррт деңгейден басталады [12].

Бұл жұмыста біз H_2^+, HD^+, D_2^+ сутегі молекулалық ионының дипольді полярлылық қатарына байланысты негізгі релятивисттік өзгертулер арқылы бірнеше есептеу жұмыстарын жургіземіз. Сондай-ақ біз ро-вибрационды жағдайдың кең спектрін талқылаймыз: L=0-5, υ=0–10. Бұл әртүрлі жағдайлар үшін сутегі молекулалық иондарының полярлылығына қатысты релястивисттік құбылыстырды байқауда алғашқы жүйелік зерттеулер болып табылады. Радиациялық түзетулердің жоғарғы қатары да $(O(\alpha^3))$ ескерілуі мүмкін, бірақ бұл тек гелий жағдайы үшін ғана алынған [13-14]. Біздің зерттелініп отырған жұмысымызда бұл мәселені карастырмаймыз, сол себепті жүргізілетін болжамдар қарапайым физикалық көп мәнді сандар сияқты 6-7 санмен шектеледі.

Бұл жұмыс барысында біз атомдық бірліктерді қолданамыз $(m_e = \hbar = e = 1)$.

Релятивисттік емес дипольді поляризация

Біз есептеулерді релятивисттік емес Шредингер теңдеуінен бастаймыз:

$$(H_0 - E_0)\Psi_0 = 0$$

$$H_0 = \frac{P_1^2}{2M_1} + \frac{P_2^2}{2M_2} - \frac{p_e^2}{2m_e} + \frac{Z_1Z_2}{R} - \frac{Z_1}{r_1} - \frac{Z_2}{r_2}, (1)$$

мұндағы P_i және M_i нуклондардың (протон немесе дейтрон) импульстары мен массалары, R ядролар арасындағы қашықтық, r_1 және r_2 1 және 2 ядроларымен сәйкесінше электрондардың ара-қашықтығы. Z_1 және Z_2 ядролырдың зарядтары, кейінірек біз $Z_1 = Z_2 = Z$ деп аламыз. $\Psi_0 = |\upsilon L\rangle$ релятивисттік емес жағдайы қозбаған күйде болады, сонымен қатар ол тербелетін және айналатын v, L кванттық сандарымен сипатталады және мұндағы E_0 энергетикалық күй болып табылады.

Электрлік дипольді ұғымдарда ε ішкі электр өрісімен әрекеттесулерді келесі формуладан аламыз:

$$V_p = -\varepsilon \cdot d, \quad d = e[Z(R_1 + R_2) - r], \qquad (2)$$

мұндағы d – сутегі молекулалық ионының электрлік диполь моменті, ионның массасының центріне қатысты R_{12} және r ядро мен электронның векторлық жағдайы.

Молекулалық ионның полярлылығы есебінен энергияның өзгеруі келесідей көрініс табады:

$$E_{p}^{(2)} = \left\langle \Psi_{0} \middle| V_{p} (E_{0} - H_{0})^{-1} V_{p} \middle| \Psi_{0} \right\rangle =$$

$$= \varepsilon^{i} \varepsilon^{j} \left\langle \Psi_{0} \middle| d^{i} (E_{0} - H_{0})^{-1} d^{j} \middle| \Psi_{0} \right\rangle = \frac{1}{2} a_{d}^{ij} \varepsilon^{i} \varepsilon^{j}, \qquad (3)$$

мұндағы *a^{ij}* екінші дәрежелі полярлылық тензоры болып табылады,

$$a_{d}^{ij} = -2 \left\langle \Psi_{0} \middle| d^{i} (E_{0} - H_{0})^{-1} d^{j} \middle| \Psi_{0} \right\rangle.$$
 (4)

Статистикалық дипольді полярлылық тензор кейінірек скалярға өзгереді [15],

$$a_{+} = \frac{2}{2L+1} \sum_{n} \frac{\langle 0L \parallel d \parallel n(L+1) \rangle \langle n(L+1) \parallel d \parallel 0L \rangle}{E_{0} - E_{n}},$$

$$a_{0} = -\frac{2}{2L+1} \sum_{n} \frac{\langle 0L \parallel d \parallel nL \rangle \langle nL \parallel d \parallel 0L \rangle}{E_{0} - E_{n}},$$

$$a_{-} = \frac{2}{2L+1} \sum_{n} \frac{\langle 0L \parallel d \parallel n(L-1) \rangle \langle n(L-1) \parallel d \parallel 0L \rangle}{E_{0} - E_{n}},$$
(5)

мұндағы $E_n | nL' \rangle$ өтпелі жағдайының энергиясы. Кеңістіктегі полярлылықты операторлық тензор L орбиталды моменттің толық санын тіркейді және келесідей көрініске ие болады:

$$a_{d}^{ij} = a_{s} + a_{t} [L^{i} L^{j} + L^{j} L^{i} - \frac{2}{3} L^{2}], \quad (6)$$

мұндағы,

$$a_{s} = \frac{1}{3}[a_{+} + a_{0} + a_{-}],$$

$$a_{t} = -\frac{a_{+}}{2(L+1)(2L+3)} + \frac{a_{0}}{2L(L+1)} - \frac{a_{-}}{2L(2L-1)}.$$
(7)

Стенографикалық векторлық жазбалардың негізгі формализмдерін келесідей жазуға болады:

$$\Psi_{1} = (E_{0} - H_{0})^{-1} d | \Psi_{0} \rangle,$$

$$a_{d} = \langle \Psi_{0} | d | \Psi_{1} \rangle = \langle \Psi_{0} | d (E_{0} - H_{0})^{-1} d | \Psi_{0} \rangle.$$
 (8)

Радиус шектеріндегі әрекеттер ро-вибрационды жағдайда қарастырылатын H_2^+, HD^+, D_2^+ иондары үшін релятивисттік емес нәтижелердің толық жиыны үшін кестелер [5]ші жұмыста көрсетілген.

Статистикалық дипольді поляризацияға α_{B} релятивисттік түзетулер:

$$a_d = a_d^{nonrel} + (1/c)^2 a^{\mathbf{B}},$$
 (9)

Дипольді поляризацияға релятивисттік түзетулер

бұл келесідей өрнектеледі:

$$a_{B} = 2\langle \Psi_{B} | d | \Psi_{1} \rangle + \langle \Psi_{1} | H_{B} - \langle H_{B} \rangle | \Psi_{1} \rangle$$

= $2\langle \Psi_{0} | H_{B}Q(E_{0} - H_{0})^{-1}Qd | (E_{0} - H_{0})^{-1}d\Psi_{0} \rangle$
+ $\langle \Psi_{0} | H_{B}Q(E_{0} - H_{0})^{-1}(H_{B} - \langle H_{B} \rangle)(E_{0} - H_{0})^{-1}d | \Psi_{0} \rangle,$ (10)

мұндағы H_{B} үш дене жүйесі үшін Брейт-Паули әрекетінің Гамильтонианы [16 17]:

$$H_{B} = -\frac{p_{e}^{4}}{8m_{e}^{3}} + \frac{4\pi}{8m_{e}^{2}} [Z_{1}\delta(r_{1}) + Z_{2}\delta(r_{2})] - \frac{P_{1}^{4}}{8M_{1}^{3}} - \frac{P_{2}^{4}}{8M_{2}^{3}} + \frac{Z_{1}}{2m_{e}M_{1}} \left(\frac{p_{e}P_{1}}{r_{1}} + \frac{r_{1}(r_{1}p_{e})P_{1}}{r_{1}^{3}}\right) + \frac{Z_{2}}{2m_{e}M_{2}} \left(\frac{p_{e}P_{2}}{r_{2}} + \frac{r_{2}(r_{2}p_{e})P_{2}}{r_{2}^{3}}\right) - \frac{Z_{1}Z_{2}}{2M_{1}M_{2}} \left(\frac{P_{1}P_{2}}{R} + \frac{R(RP_{1})P_{2}}{R^{3}}\right),$$
(11)

және Ψ_{B} — бұл Ψ_{0} релятивисттік емес толқындық функциясына релятивисттік түзету болып табылады:

$$\Psi_{B} = Q(E_{0} - H)^{-1}QH_{B} | \Psi_{0} \rangle.$$
 (12)

Жоғарыда берілген теңдеудегі Q операторы $|\Psi_{0}\rangle$ функциясына ортогональ болатын кеңістіктегі жобалық операторы. Атомдық бірлік $c = \alpha^{-l}$ ескере кеткен жөн, мұндағы α нәзік құрылымның константасы. Ψ_1 және Ψ_B толқындық функциялары үшін (8) және (12) теңдеулер сәйкесінше сызықтық теңдеулер болып табылады. Сонымен қатар в үшін соңғы Гамильтонианының мәндерді толык α_B диагонализациясыз алуға болады және ары қарай, сандық әдістерді тез әрі тұрақты түрде шығаратын деңгейлер мен псевдодеңгейлер бойынша суммалауды алуға болады.

Энергия өзгерісінің поляризациясына қатысты релятивисттік түзетулер ауытқу теориясының үшінші қатарына жатады. Сызықтық теңдеудегі α^2 параметрі релятивисттік көбеюдің шынайы параметрі болып табылады және ол ε электрлік өріс тығыздығында квадратты болып келеді.

Нәтижелер

Біздің есептеулерімізде біз ретсіз таңдалған көрсеткіштері бар экспоненциалды ұлғаю негізіндегі вариационды әдісті қолданамыз, сондай-ақ бұл туралы алдыңғы зерттеу жұмыстарында [15, 17] толық сипаттама берілген және біз мұнда әдістің айқын тұжырымдамасын ескермейміз.

Ең алдымен біз сандық нәтижелердің жинақтылығын зерттейміз. H_2^+ молекулалық ионының көрсеткіштері үшін біз жерге тұйықталған (L = 0, v = 0) жағдайды қарастырамыз. 1-ші кестеде көрініп тұрғандай, α_B релятивисттік әрекет сегіз мәнді санмен анықталуы мүмкін, яғни [19] жұмысында көрсетілгендей релятивисттік емес поляризация нақты мәнге ие болады.

Кесте 1 – Сандық нәтижелердің жинақтылығын тексеру. H_2^+ молекулалық ионының жерге тұйықталған жағдайы талқылауға алынды. Бастапқы және аралық жағдайлар үшін есептеулерде қолданылған N – негізгі функциялардың саны. Өзге де авторлармен салыстыру барысында ыңғайлы болу үшін ядролық массалар мәндері келесідей алынды: $M_p = 1836.152707m_e$ және $M_p = 36702.483014m_e$.

N	E _{NR}	ad	$(1/c)^2 a_B \times 10^2$
2000	-0.59713 90631 23404 0757	3.16872 58022 7017	-1.52753848
3000	-0.59713 90631 23405 0374	3.16872 58026 7529	-1.52753844
4000	-0.59713 90631 23405 0730	3.16872 58026 7610	-1.52753841
5000	-0.59713 90631 23405 0747	3.16872 58026 7613	-1.52753839

Сандық есептеулеріміздегі жалпы мәліметтер жиыны 2-4 кестелерінен құралған және H_2^+, HD^+, D_2^+ молекулалық иондарының поляризациясы ағымдағы жұмыстың негізгі нәтижелері болып табылады. Сол себепті, ядролардың массаларының мәні соңғы жарияланған [18] жұмысынан алынды, яғни СОДАТА тобы бойынша: $M_p = 1836.152707m_e$ және $M_p = 36702.483014m_e$. Олар сондай-ақ біздің алдыңғы релятивисттік емес есептеулерімізге [5] сәйкес келеді.

Сандық қателіктерді болдырмас үшін біз алты есе прецизионды арифметикасын қолдандық (48 ондық сандар).

Кесте 2 – H_2^+ молекулалық ионы үшін поляризация

	L = 0	L:	= 1	L:	= 2	L÷	L = 3		= 4	L = 5	
v	α_{s}	α_{s}	α_t								
0	3.1685731	3.1781425	-0.8033502	3.1973545	-0.1931356	3.2262879	-0.0914433	3.2650990	-0.0544748	3.3139976	-0.0367128
1	3.8973934	3.9099178	-1.1441799	3.9350819	-0.2750942	3.9730164	-0.1302617	4.0239695	-0.0776116	4.0882763	-0.0523165
2	4.8213113	4.8378793	-1.6000406	4.8711902	-0.3847577	4.9214594	-0.1822335	4.9890778	-0.1086134	5.0745756	-0.0732459
3	6.0091177	6.0313112	-2.2129254	6.0759600	-0.5322677	6.1434165	-0.2521933	6.2342968	-0.1503867	6.3494400	-0.1014829
4	7.5602216	7.5903867	-3.0434518	7.6511105	-0.7322788	7.7429690	-0.3471380	7.8669387	2071473	8.0243574	-0.1399094
5	9.6215210	9.6632217	-4.1811193	9.7472225	-1.0064538	9.8744707	-0.4774294	10.046534	-0.2851531	10.265571	-0.1928167
6	12.415730	12.474532	-5.7615463	12.593067	-1.3876642	12.772916	-0.6588237	13.016644	-0.3939470	13.327789	-0.2667717
7	16.290723	16.375602	9965248	16.546853	-1.9273285	16.807161	-0.9160282	17.160827	-0.5485430	17.613818	-0.3721506
8	21.809221	21.935211	-11.228720	22.189694	-2.7088006	22.577348	-1.2892136	23.105612	-0.7734482	23.784904	-0.5259745
9	29.920158	30.113640	-16.036365	30.504982	-3.8730665	31.102663	-1.8465662	31.920118	-1.1104628	32.976304	-0.7574536
10	42.306376	42.616282	-23.446097	43.244214	-5.6711694	44.206322	-2.7100353	45.528226	-1.6347899	47.246401	-1.1195399

Кесте 3 – D_2^+ молекулалық ионы үшін поляризация

	L = 0	L:	= 1	L÷	= 2	L = 3		L=	= 4	L = 5	
v	α_{s}	α_{s}	α_t	α_s	α_t	α_{s}	α_t	α_{s}	α_t	αs	α_t
0	3.0718385	3.0764328	-0.7579298	3.0856549	-0.1813369	3.0995081	-0.0852409	3.1180309	-0.0502995	3.1412711	-0.0335034
1	3.5528638	3.5584089	-0.9782491	3.5695458	-0.2340523	3.5862817	-0.1100231	3.6086695	-0.0649249	3.6367756	-0.0432467
2	4.1194070	4.1261334	-1.2485728	4.1396485	-0.2987404	4.1599666	-0.1404395	4.1871595	-0.0828801	4.2213195	-0.0552122
3	4.7910944	4.7993001	-1.5808434	4.8157922	-0.3782640	4.8405962	-0.1778400	4.8738102	-0.1049648	4.9155614	-0.0699351
4	5.5931121	5.6031855	-1.9903702	5.6234356	-0.4762945	5.6539046	-0.2239563	5.694727	-0.1322053	5.7460784	-0.0881031
5	6.5581008	6.5705539	-2.4969746	6.5955906	-0.5975866	6.6332784	-0.2810323	6.6838036	-0.1659331	6.7474075	-0.1106091
6	7.7288214	7.7443358	-3.1265993	7.7755297	-0.7483664	7.8225084	-0.3520083	7.8855305	-0.2078938	7.9649300	-0.1386246
7	9.1619614	9.1814571	-3.9136098	9.2206579	-0.9368846	9.2797220	-0.4407829	9.3590190	-0.2604042	9.4590076	-0.1737066
8	10.933664	10.958399	-4.9041347	11.008137	-1.1742218	11.083110	-0.5525959	11.183859	-0.3265811	11.311016	-0.2179523
9	13.147705	13.179427	-6.1610100	13.243217	-1.4754799	13.339457	-0.6945965	13.468847	-0.4106816	13.632332	-0.2742296
10	15.947847	15.989024	-7.7712522	16.071842	-1.8615859	16.196869	-0.8766962	16.365114	-0.5186156	16.577941	-0.3465270

Кесте 4 – HD⁺ молекулалық ионы үшін поляризация:

	L = 0	L =	= 1	L=	= 2	L=	L = 3		L = 4		L = 5	
v	α_{s}	αs	α_t	α_{s}	α_t	α_{s}	α_t	α_{s}	α_t	α_s	α_t	
0	395.27754	3.9899486	175.46989	4.0093758	13.826954	4.0386030	3.1905097	4.0777634	1.1013280	4.1270299	0.4731528	
1	462.62017	4.7029195	205.18613	4.7267328	16.142249	4.7625805	3.7153046	4.8106388	1.2779012	4.8711642	0.5463772	
2	540.64963	5.5690125	239.56394	5.5984707	18.814812	5.6429097	4.3189073	5.7025090	1.4799073	5.7776380	0.6295018	
3	631.36149	6.6325616	279.45735	6.6693071	21.908555	6.7251653	5.0148197	6.7999232	1.7113981	6.8942638	0.7239099	
4	737.27142	7.9543692	325.93821	8.0010358	25.503117	8.0716799	5.8197299	8.1666401	1.9772885	8.2866362	0.8312163	
5	861.59725	9.6180552	380.37171	9.6782520	29.699534	9.7691277	6.7545125	9.8914502	2.2835914	10.046247	0.9533009	
6	1008.5213	11.742867	444.52180	11.821446	34.627354	11.940196	7.8456173	12.100244	2.6377250	12.303109	1.0923369	
7	1183.5771	14.499937	520.70922	14.604304	40.455664	14.762192	9.1270207	14.975296	3.0489087	15.245914	1.2507930	
8	1394.2333	18.141977	612.04499	18.283320	47.409088	18.497399	10.643024	18.786825	3.5286700	19.155146	1.4313721	
9	1650.8015	23.051744	722.79107	23.247524	55.792076	23.544383	12.452318	23.946515	4.0914633	24.459532	1.6367943	
10	1967.8945	29.827372	858.93232	30.105532	66.026733	30.528154	14.633990	31.101840	4.7553467	31.835850	1.8692259	

5-кестеде кестеде өзіміздің есептеу нәтижелерін алдыңғы жұмыстардағы нәтижелермен салыстырамыз. Релятивисттік поляризация үшін мәліметтердің жоқтығынан поляризация үшін тек релятивисттік емес мәндерді кестеге енгіземіз. Барлық жағдайлар үшін біздің нәтижелеріміз алдыңғы есептеулерге ұқсас екендігін көрсетеді.

Кесте 5 – Релятивисттік емес статистикалық дипольді поляризация. Алдыңғы есептеулермен салыстыру. Атомдық масса мәндерін салыстыру оңай болу үшін келесідей алынды: $M_p = 1836.152707m_e$ және $M_p = 36702.483014m_e$.

	H_2^+	D_2^+	HD^+
Hilico et al. [2]	3.16872 5803	3.07198 8696	395.30632 88
Olivares Pileon, Baye [3]	3.16872 58026 5		
Li-Yan Tang et al. [19]	3.16872 58026 76(1)	3.07198 86956 6(7)	395.3063287972(1) ^a
Біздің жұмыс	3.16872 58026 7613(1)	3.0719886956 7511(2)	395.306328797231(3)
нәтижелері			

^aZong-Chao Yan et al. [20]

Корытынды

Сутегі молекулалық ионының поляризациясы үшін жаңа мәндердің алынғандығы туралы мәлімдейміз, және ол физикалық шамалар сияқты 6–7 мәнді санға ие, осы уақытта сандық тұрақтылық сегіз немесе одан көп санға жетеді. мәліметтер КЭД жоғарғы Бұл катарының түзетулерін қоса отырып, физикалық мәндердің тұрақтылығын өсіру үшін қолданылуы мүмкін [13]. Бұл ең алғашқы басқарылатын релятивисттік қатары бар жүйелік есептеулер екенін ескере кеткен жөн.

Әдебиеттер

1 Schiller S., Bakalov D., and Korobov V.I. Simplest Molecules as Candidates for Precise Optical Clocks // Phys. Rev. Lett. – 2014. – Vol.113. – P.023004.

4 Quan-Long Tian, Li-Yan Tang, Zong-Chao Yan, and Ting-Yun Shi, Static Dipole Polarizabilities for Low-Lying Rovibrational States of HD^{+*} // Chin. Phys. Lett. – 2015. – Vol.32. – P.083101.

² Hilico L., Billy N., Greemaud B., and Delande D. Polarizabilities, light shifts and two-photon transition probabilities between J=0 states of the H2+ and D2+ molecular ions // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. -2001. - Vol. 34. - P. 491; Karr J.-Ph., Kilic S., and Hilico L. Energy levels and two-photon transition probabilities in the HD+ ion // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. -2005. - Vol. 38. - P. 853.

³ Pilon H.O. and Baye D. Static and dynamic polarizabilities of the non-relativistic hydrogen molecular ion // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 2012. – Vol. 45. – P.235101.

5 Schiller S., Bakalov D., Bekbaev A.K., and Korobov V.I. Static and dynamic polarizability and the Stark and blackbody-radiation frequency shifts of the molecular hydrogen ions H_2^+ , HD^+ , and D_{2+} // Phys. Rev. A. – 2014. – Vol. 89. – P.052521.

6 Korobov V.I. Relativistic corrections to the dipole polarizability of the ground state of the molecular ion H_5^+ // Phys. Rev. A. - 2001. - Vol. 63. - P.044501.

7 Koelemeij J.C.J., Roth B., Wicht A., Ernsting I., and Schiller S. Vibrational Spectroscopy of HD⁺ with 2-ppb Accuracy // Phys. Rev. Lett. – 2007. – Vol.98. – P.173002.

8 Biesheuvel J., Karr J.-Ph., Hilico L., Eikema K.S.E., Ubachs W., and Koelemeij J.C.J., Probing QED and fundamental constants through laser spectroscopy of vibrational transitions in HD⁺ // Nature Comm. – 2016. – Vol.7. – P.10385.

9 Shen J., Borodin A., Hansen M., and Schiller S. Observation of a rotational transition of trapped and sympathetically cooled molecular ions // Phys. Rev. A. -2012. -Vol.85. -P.032519.

10 Bressel U., Borodin A., Shen J., Hansen M., Ernsting I., and Schiller S., Manipulation of Individual Hyperfine States in Cold Trapped Molecular Ions and Application to HD⁺ Frequency Metrology // Phys. Rev. Lett. – 2012. – Vol.108. – P.183003.

11 Korobov V.I., Hilico L., and Karr J.-Ph. Theoretical transition frequencies beyond 0.1 ppb accuracy in H_2^+ , HD^+ , and antiprotonic helium // Phys. Rev. A. – 2014. – Vol.89. – P.032511; Korobov V.I., Hilico L., and Karr J.-P. Bound-state QED calculations for antiprotonic helium // Hyperfine Interactions. – 2015. – Vol. 233. – P.75-82.

12 Korobov V.I., Koelemeij J.C.J., Karr J.-Ph., and Hilico L. Theoretical Hyperfine Structure of the Molecular Hydrogen Ion at the 1 ppm Level // Phys. Rev. Lett. – 2016. – Vol.116. – P.053003.

13 Pachucki K. and Sapirstein J. Relativistic and QED corrections to the polarizability of helium // Phys. Rev. A. - 2000. - Vol.63. - P.012504.

14 Lach G., Jeziorski B., and Szalewicz K. Radiative Corrections to the Polarizability of Helium Phys. Rev. Lett. – 2004. – Vol.92. – P.233001; Piszczatowski K., Puchalski M., Komasa J., Jeziorski B., and Szalewicz K. Frequency-Dependent Polarizability of Helium Including Relativistic Effects with Nuclear Recoil Terms // Phys. Rev. Lett. – 2015. – Vol.114. – P.173004.

15 Landau L.D. and Lifshitz E.M. Quantum Mechanics. Nonrelativistic Theory. – Oxford: Pergamon, 1977.

16 Berestetsky V.B., Lifshitz E.M. and Pitaevsky L.P. Relativistic Quantum Theory. – Oxford: Pergamon, 1982.

17 Korobov V.I. Leading-order relativistic and radiative corrections to the rovibrational spectrum of H_2^+ and HD^+ molecular ions // Phys. Rev. A. – 2006. – Vol.74. – P.052506.

18 Mohr P.J., Taylor B.N., and Newell D.B. CODATA Recommended Values of the Fundamental Physical Constants: 2010 // Rev. Mod. Phys. – 2012. – Vol.84. – P.1527-1605.

19 Li-Yan Tang, Zong-Chao Yan, Ting-Yun Shi, and Babb J.F. High-precision nonadiabatic calculations of dynamic polarizabilities and hyperpolarizabilities for low-lying vibrational-rotational states of hydrogen molecular ions // Phys. Rev. A. – 2014. – Vol.90. – P.012524.

20 Zong-Chao Yan, Jun-Yi Zhang, and Yue Li. Energies and polarizabilities of the hydrogen molecular ions // Phys. Rev. A. -2003. - Vol.67. - P.062504.

References

1 S. Schiller, D. Bakalov, and V.I. Korobov, Phys. Rev. Lett. 113, 023004 (2014). doi.org/10.1103/PhysRevLett.113.023004

2 L. Hilico, N. Billy, B. Groemaud, and D. Delande, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 34, 491 (2001); J.-Ph. Karr, S. Kilic, and L. Hilico, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 38, 853 (2005).

3 H. Olivares Pilon and D. Baye, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 45, 235101 (2012).

4 Quan-Long Tian, Li-Yan Tang, Zong-Chao Yan, and Ting-Yun Shi, Chin. Phys. Lett. 32, 083101 (2015).

5 S. Schiller, D. Bakalov, A.K. Bekbaev, and V.I. Korobov, Phys. Rev. A 89, 052521 (2014). doi.org/10.1103/PhysRevA.89.052521

6 V.I. Korobov, Phys. Rev. A 63, 044501 (2001). doi.org/10.1103/PhysRevA.63.044501

7 J.C.J. Koelemeij, B. Roth, A. Wicht, I. Ernsting, and S. Schiller, Phys. Rev. Lett. 98, 173002 (2007). doi.org/10.1103/PhysRevLett.98.173002

8 J. Biesheuvel, J.-Ph. Karr, L. Hilico, K.S.E. Eikema, W. Ubachs, and J.C.J. Koelemeij, Nature Comm. 7, 10385 (2016). doi:10.1038/ncomms10385

9 J. Shen, A. Borodin, M. Hansen, and S. Schiller, Phys. Rev. A 85, 032519 (2012). doi.org/10.1103/PhysRevA.85.032519

10 U. Bressel, A. Borodin, J. Shen, M. Hansen, I. Ernsting, and S. Schiller, Phys. Rev. Lett. 108, 183003 (2012).

11 V.I. Korobov, L. Hilico, and J.-Ph. Karr, Phys. Rev. A 89, 032511 (2014) doi.org/10.1103/PhysRevA.89.032511; V.I.

Korobov, L. Hilico, and J.-P. Karr, Hyperfine Interactions 233, 75-82 (2015) DOI 10.1007/s10751-015-1149-5 .

12 V.I. Korobov, J.C.J. Koelemeij, J.-Ph. Karr, and L. Hilico, Phys. Rev. Lett. 116, 053003 (2016).

13 K. Pachucki and J. Sapirstein, Phys. Rev. A 63, 012504 (2000).

14 G. Lach, B. Jeziorski, and K. Szalewicz, Phys. Rev. Lett. 92, 233001 (2004) doi.org/10.1103/PhysRevLett.92.233001; K. Piszczatowski, M. Puchalski, J. Komasa, B. Jeziorski, and K. Szalewicz, Phys. Rev. Lett. 114, 173004 (2015) doi.org/10.1103/PhysRevLett.114.173004.

15 L.D. Landau and E.M. Lifshitz, Quantum Mechanics. Nonrelativistic Theory (Pergamon, Oxford, 1977).

16 V.B. Berestetsky, E.M. Lifshitz and L.P. Pitaevsky, Relativistic Quantum Theory, (Oxford, Pergamon, 1982).

17 V.I. Korobov, Phys. Rev. A 74, 052506 (2006) doi.org/10.1103/PhysRevA.74.052506.

18 P.J. Mohr, B.N. Taylor, and D.B. Newell, Rev. Mod. Phys. 84, 1527 (2012) doi:10.1103/RevModPhys.84.1527

19 Li-Yan Tang, Zong-Chao Yan, Ting-Yun Shi, and J.F. Babb, Phys. Rev. A 90, 012524 (2014). doi.org/10.1103/PhysRevA.90.012524

20 Zong-Chao Yan, Jun-Yi Zhang, and Yue Li, Phys. Rev. A 67, 062504 (2003). doi.org/10.1103/PhysRevA.67.062504.

МРНТИ 34.05.93

Жумадилов К.Ш.^{1*}, Иванников А.И.², Степаненко В.Ф.², Тойода Ш.³, Хоши М.⁴

¹Международная кафедра ядерной физики, новых материалов и технологий, Евразийский Национальный университет им. Гумилева Л.Н., Казахстан, Астана ²МРНЦ им. А.Ф. Цыба – филиал ФГБУ «НМИРЦ» Минздрава России, Обнинск ³Университет Науки Окаямы, Япония, Окаяма ⁴Университет Хиросимы, Япония, Хиросима *e-mail: zhumadilovk@gmail.com

ДОЗИМЕТРИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НАСЕЛЕНИЯ СЕЛА, ПОДВЕРГШЕГОСЯ ОБЛУЧЕНИЮ ПОСЛЕ ИСПЫТАНИЯ 29 АВГУСТА 1949 ГОДА НА СЕМИПАЛАТИНСКОМ ПОЛИГОНЕ

В статье приведены результаты обследования методом ЭПР (электронно-парамагнитный резонанс) дозиметрии по зубной эмали. ЭПР-дозиметрия была использована для определения индивидуальной дозы облучения жителей района, расположенного вблизи следа радиоактивного выпадения осадков вследствие ядерного испытания 29 августа 1949 года, приведшего к загрязнению огромной территории (села Долонь и Бодене, Бескарагайского района, Восточно-Казахстанской области). Поглощенную дозу в эмали определяли по амплитуде радиационно-индуцированного сигнала в эмали, используя калибровочную зависимость. Для получения наилучшей точности определения дозы каждый образец зубной эмали измеряли, по меньшей мере, 4 раза. Индивидуальные избыточные дозы определялись путем вычитания вклада естественного фонового излучения из экспериментальных поглощенных доз. Было показано, что у жителей сел Долонь и Бодена с возрастом формирования эмали до 1949 года, индивидуальные избыточные дозы составляли до 300 мГр, со средним значением 57±36 мГр; Индивидуальные дозы для молодых жителей составляли до 100 мГр, со средним значением 13±10 мГр. В результате исследований жители сел Бодене и Долонь получили максимальную дозу облучения 356 мГр.

Ключевые слова: ЭПР-дозиметрия, зубная эмаль, доза радиации, Семипалатинский испытательный ядерный полигон, Долонь, Бодене

Zhumadilov K.Sh.^{1*}, Ivannikov A.I.², Stepanenko V.F.², Toyoda S.³, Hoshi M.⁴ ¹International Department of Nuclear Physics, New Materials and Technology, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Kazakhstan, Astana ²A.F. Tsyb Medical Radiological Research Center, Russia, Obninsk ³Department of Applied Physics Faculty of Science Okayama University of Science, Japan ⁴Hiroshima University, Japan ^{*}e-mail: zhumadilovk@gmail.com

Dosimetry study of exposed population of villages, after the test in August 29, 1949 at the Semipalatinsk test site

The article presents the results of a survey by EPR (Electron Paramagnetic Resonance) dosimetry on tooth enamel. The EPR dosimetry was used to determine individual radiation dose for the residents of the area located close to radioactive fallout trace of the most contaminating nuclear test of 1949 (Dolon and Bodene villages of Beskargai district, East-Kazakhstan oblast). Absorbed dose in enamel was determined

from amplitude of radiation-induced signal in enamel, using measured calibration dependence. For obtaining the best accuracy of dose determination, each tooth enamel samples were measured at least four times. Individual excess doses were determined by subtraction of contribution of natural background radiation from the experimental absorbed doses. It was shown that for residents of Dolon and Bodene having tooth enamel formed before 1949, individual excess doses ranged up to 300 mGy with average value of 57 ± 36 mGy; individual doses for younger residents ranged up to 100 mGy with average value of 13 ± 10 mGy. The Bodene and Dolon villagers studies received the maximum dose 356 mGy.

Key words: EPR dosimetry, tooth enamel, the radiation dose, Semipalatinsk Nuclear Test Site, Dolon, Bodene.

> Жумадилов К.Ш.^{1*}, Иванников А.И.², Степаненко В.Ф.², Тойода Ш.³, Хоши М.⁴

¹Ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялар халықаралық кафедрасы, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Қазақстан, Астана ²Ресей Федерациясының Денсаулық сақтау министрлігінің «ҒМЗО» Федералдық Мемлекеттік бюджеттік мекемесінің филиалы А.Ф. Цыб атындағы МРҒО, Обнинск ³Окаяма Ғылым Университеті, Жапон, Окаяма ⁴Хиросима Университеті, Жапон, Хиросима *e-mail: zhumadilovk@gmail.com

Семей полигонындағы 29 тамызда 1949 жылғы сынақтан кейін сәулеленуге ұшыраған ауыл тұрғындарын дозиметрлік зерттеу

Мақалада тіс эмалы бойынша дозиметриялау ЭПР (электронды-парамагнитті резонанс) тәсілімен зерттеу нәтижелері келтірілген. ЭПР-дозиметрия ауқымды территорияның ластануына алып келген (Долонь және Бөдене ауылдары, Бесқарағай ауданы, Шығыс Қазақстан облысы) 1949 жылдың 29 тамызындағы ядролық сынақ салдарынан радиоактивті тұңбалар ізінің жанында орналасқан аудан тұрғындарының сәулелену жеке мөлшерін анықтау үшін қолданылған. Эмальдағы сіңірілген мөлшерді калибрленген тәуелділікті қолдана отырып, эмальдағы радиациялық-ықпалдандырылған белгі амплитудасы бойынша анықтаған. Мөлшерді дәл анықтау үшін әрбір тіс эмалы үлгісін кем дегенде 4 рет өлшеген. Жеке артық мөлшерлер эксперименттік сіңірілген мөлшерден табиғи фондық сәулелену үлесін алып тастау жолымен анықталған. Долонь және Бөдене ауылдары тұрғындарының жасы келе эмальдің қалыптасуы 1949 жылға дейін жеке артық мөлшерлер 30 мГр, орташа мәнде 57 ± 36 мГр құраған; Жас тұрғындар үшін жеке мөлшерлер 100 мГр дейін, орташа мәнде 13 ± 10 мГр құрағандығы дәлелденген. Зерттеу нәтижесінде Бөдене және Долонь аулыдарының тұрғындары максималды сәулелену мөлшерін 356 мГр алды.

Түйін сөздер: ЭПР-дозиметриясы, радиация дозасы, Семей ядролық сынақ полигоны, Долонь, Бөдене.

Введение

29 августа 1949 года было проведено первое ядерное испытание на «Опытном поле» на территории Семипалатинского испытательного ядерного полигона (СИЯП), которое подвергло радиоактивному загрязнению огромную территорию СИЯП и примыкающие к полигону территории. Последующие ядерные взрывы еще больше повысили уровень радиоактивного загрязнения, которое к тому моменту уже являлось значительным. Взрыв приводил к образованию громадной массы радиоактивной пыли. Данное облако пыли было перенесено ветром и его постепенное оседание образовало след радиоактивного выпадения. Данные о динамике оседания пыли радиоактивного облака в зоне, примыкающей к СИЯП, отсутствуют. Очень трудно восстановить индивидуальные и коллективные дозы облучения местного населения [1-4].

ЭПР-дозиметрия является очень эффективным инструментом для работ по восстановлению полученных доз [5, 6]. Этот метод способен определять дозы облучения даже спустя более 40 лет после облучения. ЭПР измеряет количество стабильных свободных радикалов, образованных вследствие радиационного излучения, в зубной эмали [7-9].

Целью данной работы является определение доз, полученных жителями сел Бодене и Долонь, расположенных вблизи следа радиоактивных выпадений, образованного вследствие самого разрушительного ядерного испытания 1949 года посредством использования метода ЭПР-дозиметрии по образцам зубной эмали, собранных в вышеназванных населенных пунктах [10-15].

Материалы и методы

Отбор образцов. Для проведения данного исследования были измерены образцы 24 зубов, удаленные на основании медицинских показаний у взрослого населения сел Бодене и Долонь, 20 из них были из села Бодене (расположенного к юго-востоку от Долони) и 4 получено из села Долонь. Также, 5 зубов были собраны в ходе обследования населения села Кокпекты (400 км восточнее испытательного полигона), которое не подвергалось радиоактивному облучению. Из 24 зубов из Бодене и Долони, эмаль 19 зубов была сформирована до 1962 г., до окончания испытаний в атмосфере, а эмаль 11 зубов была сформирована до 1949 г., даты первого испытания.

Подготовка образцов. Эмаль механически отделили от дентина, используя твердосплавный бор. Дентин осторожно удалили, охлаждая водой во избежание перегрева образца, провоцирующего образование дополнительного ЭПРсигнала и значительное изменение формы сигнала [15-17]. Эмаль раздробили кусачками на гранулы диаметром 0,5-1,5 мм. Из каждого зуба были подготовлены по два образца (из щечной и языковой частей каждого зуба).

Калибровочные образцы. Образцы эмали для калибровки доз были подготовлены из коренных зубов, взятых у жителей села Кокпекты, которое не подвергалось радиоактивному воздействию вследствие ядерных испытаний на СИЯП. Образцы эмали для оптимизации параметров измерения были подготовлены из коренных зубов, собранных в стоматологической клинике Университета Хиросимы. Эмали из разных зубов были смешаны и далее были также подготовлены аликвоты массой 100 мг. Аликвоты были облучены по дозам 0, 100, 200, 300 и 500 мГр соответственно источником ⁶⁰Со в Университете Хиросимы [6-8].

Спектральные ЭПР измерения. Измерения были осуществлены в диапазоне частот Х на ЭПР-спектрометре JEOL JES-FA 100 при комнатной температуре 21°С. Спектрометр снабжен цилиндрическим резонатором ТЭ ES-UCX2 с высоким коэффициентом добротности [18, 19]. Были установлены следующие параметры измерения спектров: амплитуда модулирующего сигнала – 0,3 Мт, частота модуляции – 100 кГц, ресивер временной постоянной – 30 мс, время развёртки – 30 сек., кадровая развертка – 10 Мт, микроволновая мощность - 2 мВт; число сканирований – 40, время набора спектров – 20 мин. ЭПР обработка спектров проводилась при помощи специально разработанного программного обеспечения [18, 19]

Примеры зависимостей экспериментальных доз от номинальных по результатам, полученным на основе измерений одного спектра, и среднему показателю результатов, полученных на основе четырех измерений спектров, показаны на рис. 1. Квадратичное отклонение было определено для экспериментальных доз, полученных из единичного измерения (SDS) и для средней дозы, полученной из четырех измерений (SDR).



a) b)



Результаты и обсуждение

Продолжительность жизни зубной эмали была рассчитана путем вычитания среднего возраста формирования зуба для конкретного расположения зуба из возраста человека на момент измерения. Возрасты формирования зубной эмали были установлены согласно опубликованным данным [5].

Пробы эмали, собранные у населения села Долонь, были разделены на 2 группы в соответствии с продолжительностью жизни зубной эмали. Первая группа включала жителей с зубной эмалью, сформированной после 1949 года (год проведения первого ядерного взрыва), а вторая группа включала жителей с зубной эмалью, сформированной до 1949 года.

Для всех проб иаварийные дозы были рассчитаны посредством уравнения:

$$D_{ex} = D_{en} - TA * D_{b}, \qquad (1)$$

где D_{en} – поглощенная доза, рассчитанная автоматизированной программой, в мГр; ТА – возраст зубной эмали, лет; D_b – фоновая доза облучения, 0,8 мГр/год [19].

Аварийные дозы были обнаружены в диапазоне от -66,7 ± 38,67 до 356 ± 57,6 мГр. Пробы, подготовленные из языковых частей всех зубов и щечных частей зубов бокового ряда (5-8) были выбраны для использования при расчете доз. Уникальным источником может быть индивидуальная вариация фонового компонента дозы, который оценивается на основе измерений контрольных образцов, собранных в других деревнях.

Стандартное отклонение определения доз (Er) было определено по полуэмпирической формуле описанной в предыдущей публикации [12].

Корреляция поглощенной дозы между язычными и щечными частями зубов показана на рис. 2. Среднеквадратичное отклонение поглощенных доз между языковыми и щечными частями находится в рамках среднего значения неопределенности расчета дозы. Систематически повышенные дозы в щечной эмали отсутствуют. Это означает, что эмаль не подвергалась солнечному световому излучению и медицинскому рентгеновскому облучению, за исключением, одной пробы. Данный случай должен быть проанализирован отдельно. Возможно, он на самом деле подвергался рентгеновскому облучению, и необходимо произвести поправку по данной дозе подобно ранее упомянутому случаю.



Рисунок 2 – Корреляция поглощенных доз, определенных для эмали с языковой и щечной стороны зубов. Параметры линейной регрессии представлены на панели рисунка. Среднеквадратичное отклонение между языковой и щечной дозами (56 мГр) характеризует точность определения дозы.

На рис. 3 показаны определения индивидуальных аварийных доз для разных возрастов образования эмали. Повышенное значение дозы было определено для одной пробы, образованной до 1949 г. Среднее значение аварийной дозы для эмали до 1949 г. составляет 74,1 ± 45,5 мГр (кроме пробы с наивысшей дозой, средняя доза составляет 46 ± 44 мГр), для эмалей, образованной после 1949 года средняя доза составляет 11,53 ± 37,7 мГр. Основная часть аварийных доз находятся около порога чувствительности метода.





Рисунок 4 – Индивидуальные аварийные дозы, определенные для различных групп населения: 1 – Большевик; 2 – Долонь; 3 – Бодене

Избыточные дозы для разных групп населения представлены на рис. 4. Для контрольных образцов дозы были определены в диапазоне от -66,7 \pm 38,67 до 24 \pm 39,31 мГр, для Бодене от -50,3 \pm 37,5 до 356 \pm 57,6 мГр, и для села Долонь от 0,1 \pm 40,4 до 115,5 \pm 56,8 мГр. Диапазон по-глощенных доз, определенных для села Долонь, рассчитанных автоматизированной программой, был от 1,7 \pm 51,4 до 205 \pm 94,5 мГр. Низкие дозы были обнаружены для группы с эмалью, сформированной после 1962 года, после окончания ядерных испытаний в атмосфере. Значения доз для группы с эмалью, образованной после 1962

г., в соответствии с оценками на основе официальных данных, указывающих на высокие уровни осадков в период с 1949 по 1962 гг. Экспериментально измеренные индивидуальные дозы могут быть сравнены с восстановлением дозы на основе архивных данных, которые составляют 0,4-1,5 Гр для села Долонь. Результаты, полученные посредством ЭПР-дозиметрии ниже в сравнении с результатами восстановления дозы на основе архивных данных, поскольку они выдают информацию об индивидуальных дозах, которые должны быть проанализированы с учетом индивидуального поведения и возможных индивидуальных перемещений.

Заключение

При помощи метода ЭПР-дозиметрии по зубной эмали были восстановлены дозы для жителей двух населенных пунктов, расположенных вблизи наиболее радиоактивного следа после испытания 1949 г. Значение повышенной дозы было определено в одной пробе, с эмалью сформированной после 1949 г. из села Бодене, соответствующей ядерному испытанию 1949 года. Среднее значение дозы было 74,1 \pm 45,5 мГр по образцам с зубной эмалью, сформированной до 1949 г. Более молодое поколение получило дозу до 100 мГр, со средним показателем 11,5 \pm 37,7 мГр. Необходимо исследовать больше проб для составления окончательного заключения о ситуации в данном регионе.

Литература

1 Deliglasow V.I., Gorin V.V., Maltzev A.L., Matusehnko A.M., Safonov F.F. and Smagulov S.G. Radiological situation at Semipalatinsk test site bordering regions of the Kazakh SSR / Bulletion of the Public information center by atomic Energy (CNII atominform). Moscow. Russia. -1991. - 4. - P. 46-52.

2 Dubasov U.V., Matuschenko A.M., Filonov N.P. Semipalatinsk Test Site: estimation of radiological consequences / Bulletion of the Public information center by atomic Energy (CNII atominform). Special issue. Moscow. Russia. – 1993.

3 Artemev O.I., Akhmetov M.A., Larin V.N., Ptitskaya L.D., Zhumadilov K.S., Silkina G.P., Subbotin S.B., Radiation survey and radionuclide analysis of radioactive plumes from the former Semipalatinsk nuclear test site / Conference: NATO Advanced Research Workshop on Nuclear Physical Methods in Radioecological Investigations of Nuclear Test Sites. Place: Almaty, Kazakhstan, June 07-10, 1999. Nuclear physical methods in radioecological investigations of nuclear test sites. NATO advanced science institute series, sub-series: Disarmament technologies. – 2000. – 31. – P. 127-143.

4 Gordeev K., Shinkarev S., Ilyin L., Bouville A., Hoshi M., Luckyanov N., Simon S.L. Retrospective dose assessment for the population living in areas of local fallout from the Semipalatinsk nuclear test site Part I: External exposure / J. Radiat. Res. -2006. -47. -P. A129-136.

5 IAEA Report. Use of electron paramagnetic resonance dosimetry with tooth enamel for retrospective dose assessment. Report of a coordinated research project / IAEA-TECDOC-1331. Vienna. – 2002.

6 Tielewuhan E., Ivannikov A., Zhumadilov K., Nalapko M., Tikunov D., Skvortsov V., Stepanenko V., Toyoda Sh., Tanaka K., Endo S., Hoshi M. Spectra processing at tooth enamel dosimetry: analytical description of EPR spectrum at different microwave power / Radiat. Meas. – 2006. – 41. – P. 410–417.

7 Tanaka K., Endo S., Ivannikov A., Toyoda S., Tieliewuhan E., Zhumadilov K., Miyazawa C., Suga S., Kitagawa K., Hoshi M. Study on influence of X-ray baggage scan on ESR dosimetry for SNTS using human tooth enamel / J. Radiat. Res. – 2006. – 46. – P. 435-442.

8 Zhumadilov K., Stepanenko V., Ivannikov A., Zhumadilov Z., Toyoda S., Tanaka K., Endo S. and Hoshi M. Measurement of absorbed doses from X-ray baggage examinations to tooth enamel by means of ESR and glass dosimetry / Radiat. Environ. Biophys. – 2008. – 47. – P. 541-545.

9 Stepanenko V.F., Hoshi M., Dubasov Yu.V., Sakaguchi A., Yamamoto M., Orlov M., Bailiff I.K., Ivannikov A.I., Skvortsov V.G., Kryukova I.G., Zhumadilov K.S., Apsalikov K.N., Gusev B.I. A gradient of radioactive contamination in Dolon village near SNTS and comparison of computed dose values with instrumental estimates for the 29 August, 1949 nuclear test / J. Radiat. Res. – 2006. – 47. – P. A149-A158.

10 Stepanenko V.F., Hoshi A., Ivannikov A.I., Bailiff I.K., Zhumadilov K., Skvortsov V.G., Argembaeva R., Tsyb A.F. The 1st Nuclear Test in the former USSR of 29 August, 1949: comparison of individual dose estimates by modeling with EPR retrospective dosimetry and luminescence retrospective dosimetry data for Dolon village, Kazakhstan / Radiat. Meas. – 2007. – 42. – P. 1041-1048.

11 Ivannikov A., Zhumadilov K., Tieliewuhan E., Jiao L., Apsalikov K.N., Berekenova G., Zhumadilov Zh., Toyoda Sh., Miyazawa C., Skvortsov V., Stepanenko V., Endo S., Tanaka K. and Hoshi M. Results of EPR dosimetry for population in the vicinity of the most contaminating radioactive fallout trace after the first nuclear test in the Semipalatinsk Test Site / J. Radiat. Res. – 2006. – 47. – P. A39-A46.

12 Zhumadilov K., Ivannikov A., Apsalikov K.N., Zhumadilov Zh., Toyoda Sh., Tieliewuhan E., Endo S., Tanaka K., Miyazawa C., Okamoto T. and Hoshi M. Radiation dose estimation by tooth enamel EPR dosimetry for residents of Dolon and Bodene / J. Radiat. Res. – 2006. – 47. – P. A47-A53.

13 Zhumadilov K.S., Ivannikov A.I., Skvortsov V.G., Zhumadilov Zh.S., Endo S., Tanaka K. and Hoshi M. Tooth enamel EPR dosimetry: selecting optimal spectra registration parameters and effects of sample mass on sensitivity / J. Radiat. Res. -2005. -46. - P. 435-442.

14 Ivannikov A.I., Trompier F., Gaillard-Lecanu E., Skvortsov V.G. and Stepanenko V.F. Optimization of recording conditions for the electron paramagnetic resonance signal used in dental enamel dosimetry / Radiat. Prot. Dosim. – 2002. – 100. – P. 531-538.

15 Zhumadilov K., Ivannikov A., Apsalikov K., Zhumadilov Zh., Stepanenko V., Skvortsov V., Berekenova G., Toyoda S., Endo S., Tanaka K., Miyazawa C. and Hoshi M. Results of tooth enamel EPR dosimetry for population living in the vicinity of the Semipalatinsk nuclear test site / Radiat. Meas. – 2007. – 42. – P. 1049-1052.

16 Ivannikov A.I., Sanin D., Nalapko M., Skvortsov V.G., Stepanenko V.F., Tsyb A.F., Trompier F., Zhumadilov K., and Hoshi M. Dental enamel EPR dosimetry: comparative testing of the spectra processing methods for determination of Radiation induced-signal amplitude. / Health Phys. – 2010. – 98. – P. 345-351.

17 Ivannikov A.I., Skvortsov V.G., Stepanenko V.F., Zhumadilov K.Sh. Comparative analysis between radiation doses obtained by epr dosimetry using tooth enamel and established analytical methods for the population of radioactively contaminated territories / Radiat. Prot. Dosim. -2014. - 159. - P. 125-129.

18 Zhumadilov K, Ivannikov A., Zhumadilov Z., Stepanenko V., Apsalikov K., Rodzi M., Zhumadilova A., Toyoda S., Endo S., Tanaka K., Okamoto T. and Hoshi M. ESR dosimetry study on population of settlements nearby Ust-Kamenogorsk city, Kazakhstan / Radiat. Environ. Biophys. – 2009. – 48. – P. 419–425.

19 Zhumadilov K., Ivannikov A., Stepanenko V., Toyoda S., Zhumadilov Z. and Hoshi M. ESR dosimetry study of population in the vicinity of the Semipalatinsk Nuclear Test Site / J. Radiat. Res. – 2013. – 54. – P. 775-779.

References

1 V.I. Deliglasow, V.V. Gorin, A.L. Maltzev, A.M. Matusehnko, F.F. Safonov and S.G. Smagulov, Bulletion of the Public information center by atomic Energy (CNII atominform). Moscow. Russia, 4, 46-52, (1991).

2 U.V. Dubasov, A.M. Matuschenko, and N.P. Filonov, Bulletion of the Public information center by atomic Energy (CNII atominform). Moscow, Russia, Special issue, (1993).

3 O.I. Artemev, M.A. Akhmetov, V.N. Larin, L.D. Ptitskaya, K.S. Zhumadilov, G.P. Silkina, and S.B. Subbotin, Conf. NATO Advanced Research Workshop on Nuclear Physical Methods in Radioecological Investigations of Nuclear Test Sites. (Almaty, Kazakhstan, June 07-10, 1999). Nuclear physical methods in radioecological investigations of nuclear test sites. NATO advanced science institute series, sub-series: Disarmament technologies, 31, 127-143, (2000).

4 K. Gordeev, S. Shinkarev, L. Ilyin, A. Bouville, M. Hoshi, N. Luckyanov, and S.L. Simon, J. Radiat. Res. 47, A129-136, (2006).

5 IAEA Report. Use of electron paramagnetic resonance dosimetry with tooth enamel for retrospective dose assessment. Report of a coordinated research project (IAEA-TECDOC-1331. Vienna, 2002).

6 E. Tielewuhan, A. Ivannikov, K. Zhumadilov, M. Nalapko, D. Tikunov, V. Skvortsov, V. Stepanenko, Sh. Toyoda, K. Tanaka, S. Endo, and M. Hoshi, Radiat. Meas. 41, 410–417, (2006).

7 K. Tanaka, S. Endo, A. Ivannikov, S. Toyoda, E. Tieliewuhan, K. Zhumadilov, C. Miyazawa, S. Suga, K. Kitagawa, and M. Hoshi, J. Radiat. Res. 46, 435-442, (2006).

8 K. Zhumadilov, V. Stepanenko, A. Ivannikov, Z. Zhumadilov, S. Toyoda, K. Tanaka, S. Endo, and M. Hoshi, Radiat. Environ. Biophys. 47, 541-545, (2008).

9 V.F. Stepanenko, M. Hoshi, Yu.V. Dubasov, A. Sakaguchi, M. Yamamoto, M. Orlov, I.K. Bailiff, A.I. Ivannikov, V.G. Skvortsov, I.G. Kryukova, K.S. Zhumadilov, K.N. Apsalikov, and B.I. Gusev, J. Radiat. Res. 47, A149-A158, (2006).

10 V.F. Stepanenko, A., Hoshi, A.I. Ivannikov A.I., I.K. Bailiff, K. Zhumadilov, V.G. Skvortsov, R. Argembaeva, and A.F. Tsyb, Radiat. Meas. 42, 1041-1048, (2007).

11 A. Ivannikov, K. Zhumadilov, E. Tieliewuhan, L. Jiao, K.N. Apsalikov, G. Berekenova, Zh. Zhumadilov, Sh. Toyoda, C. Miyazawa, V. Skvortsov, V. Stepanenko, S. Endo, K. Tanaka and M. Hoshi, J. Radiat. Res. 47, A39-A46, (2006).

12 K. Zhumadilov, A. Ivannikov, K.N. Apsalikov, Zh. Zhumadilov, Sh. Toyoda, E. Tieliewuhan, S. Endo, K. Tanaka, C. Miyazawa, T. Okamoto, and M. Hoshi, J. Radiat. Res. 47, A47-A53, (2006).

13 K.S. Zhumadilov, A.I. Ivannikov, V.G. Skvortsov, Zh.S. Zhumadilov, S. Endo, K. Tanaka and M. Hoshi, J. Radiat. Res. 46, 435-442, (2005).

14 A.I. Ivannikov, F. Trompier, E. Gaillard-Lecanu, V.G. Skvortsov, and V.F. Stepanenko, Radiat. Prot. Dosim. 100, 531-538, (2002).

15 K. Zhumadilov, A. Ivannikov, K. Apsalikov, Zh. Zhumadilov, V. Stepanenko, V. Skvortsov, G. Berekenova, S. Toyoda, S. Endo, K. Tanaka, C. Miyazawa, and M. Hoshi, Radiat. Meas. 42, 1049-1052, (2007).

16 A.I. Ivannikov, D. Sanin, M. Nalapko, V.G. Skvortsov, V.F. Stepanenko, A.F. Tsyb, F. Trompier, K. Zhumadilov, and M. Hoshi, Health Phys. 98, 345-351, (2010).

17 A.I. Ivannikov, V.G. Skvortsov, V.F. Stepanenko, and K.Sh. Zhumadilov, Radiat. Prot. Dosim. 159, 125-129, (2014).

18 K. Zhumadilov, A. Ivannikov, Z. Zhumadilov, V. Stepanenko, K. Apsalikov, M. Rodzi, A. Zhumadilova, S. Toyoda, S. Endo, K. Tanaka, T. Okamoto, and M. Hoshi, Radiat. Environ. Biophys. 48, 419–425, (2009).

19 K. Zhumadilov, A. Ivannikov, V. Stepanenko, S. Toyoda, Z. Zhumadilov, and M. Hoshi, J. Radiat. Res. 54, 775-779, (2013).

МРНТИ 29.15.15

Блынский П.А.*, Панова Е.Н., Жаксыбекова К.А., Кенжина И.Е.

ТОО «Институт высоких технологий» АО «НАК «Казатомпром», Казахстан, Алматы, *e-mail: p.blynskiy@iht.kz

ВОССТАНОВЛЕНИЕ ПОДЗЕМНЫХ ВОД РУДНОГО ГОРИЗОНТА ОТРАБОТАННЫХ УРАНОВЫХ МЕСТОРОЖДЕНИЙ В ПРОЦЕССЕ РЕКУЛЬТИВАЦИИ

При подземном выщелачивании загрязнение обычно сводится к воздействию на земную поверхность и водоносный горизонт вредных для здоровья человека и живой природы химически активных веществ, используемых и образующихся в процессе извлечения урана из недр. Хотя это загрязнение имеет локальный характер, оно должно контролироваться как в процессе подземного выщелачивания, так и после его завершения при рекультивации. В ходе проведения рекультивационных работ на отработанных урановых месторождениях РК главным условием является возвращение используемых территорий до их исходного состояния. Основной проблемой в данном случае является высокая кислотность подземного горизонта. Одним из способов решения может являться нейтрализация щелочными растворами. Для ускорения рекультивации отработанных урановых месторождений предполагается использовать гидроксид натрия. Рассмотрена возможность использования очищенного гидроксида натрия I-го контура реакторной установки БН-350. В данной работе представлены результаты исследования восстановления рудного горизонта отработанных урановых месторождений РК и его сорбционных свойств по отношению к техногенным радионуклидам.

Ключевые слова: радиоактивность, уран, цезий.

Blynskiy P.A., Panova E.N., Zhaksybekova K.A., Kenzhina I.E. Kazatomprom JSC NAC "Institute of High Technologies" LTD, Kazakhstan, Almaty, *e-mail: p.blynskiy@iht.kz

Recovery of the groundwater of spent uranium deposits ore horizon during the remediation process

The pollution in underground leaching usually reduces to the impact on the earth's surface and aquifer harmful to human health and living nature of chemically active substances used and formed during the extraction of uranium from the subsoil. Although this pollution has local nature, it must be controlled both during the underground leaching process and after its completion during remediation. The main condition during remediation process on spent uranium deposits of the Republic of Kazakhstan, is return of used territories to their initial state. The main problem in this case is the high acidity of the underground horizon. The neutralization with alkaline solutions could be one of the solutions. It is proposed to use sodium hydroxide to accelerate the remediation of spent uranium deposits. The possibility of using purified sodium hydroxide of the first circuit of the BN-350 fast reactor facility was considered in this work. This paper presents the results of a study of the recovery of the ore horizon of spent uranium deposits in the Republic of Kazakhstan and its sorption properties with respect to technogenic radionuclides.

Key words: radioactivity, uranium, cesium.

Блынский П.А., Панова Е.Н., Жаксыбекова К.А., Кенжина И.Е. «Қазатомөнеркәсіп» ҰАК» АҚ «Жоғары технологиялар институты» ЖШС, Қазақстан, Алматы, *e-mail: p.blynskiy@iht.kz

Игерілген кен орнының құнарлығын қайта қалпына келтіру үрдісінде жерасты суларын қалпына келтіру

Жерасты шаймалау кезінде ластану әдетте жер бетіне және адамның денсаулығына зиянды су тұтқыш жиектеріне және жер қойнауынан уран өндіру кезінде құралатын және пайдаланылатын химиялық белсенді заттардың табиғатқа зиянды әсерін келтіріп соғады. Осы ластануы жергілікті болғанымен, ол жерасты ұңғымалы шаймалау процесінде, сондай-ақ қалпына келтіру аяқталғаннан кейінде бақылауда болуы керек. ҚР-ның игерілген уран кен орындарында құнарлығын қайта қалпына келтіру жұмыстарын жүргізу мақсаты пайдаланылған территорияны бастапқы күйіне келтіру болып табылады. Қазіргі жағдайда басты мәселе жерасты горизонтының жоғары қышқылдылығы. Мәселені шешудің бір жолы ол сілтілік ерітінділермен бейтараптандыру мүмкін болады. Игерілген кен орындарының құнарлығын қайта қалпына келтіруді жеделтету үшін натрий гидроксидін пайдалану болжанып отыр. 1- ші контур реакторлық БН-350 қондырғысының тазартылған натрий гидроксидін пайдалану мүмкіндігі қарастырылған. Бұл жұмыста ҚР-ның игерілген кен орындарының кралы горизонтын қайта қалпынакелтіру зерттеу жұмыстарының нәтижелері келтірілген.

Түйін сөздер: радиоактивтілік, уран, цезий.

Введение

В настоящее время добыча урана методом скважинного подземного выщелачивания является сырьевой основой существования урановой промышленности Республики Казахстан. Запасы урана в месторождениях, пригодных для разработки данным способом, чрезвычайно велики, и способны обеспечить высокорентабельную добычу в течение более чем ста лет [1-4].

В связи с развитием добычи урана способом подземного скважинного выщелачивания и завершением отработки некоторых месторождений, весьма актуальным стал вопрос разработки приемлемых способов рекультивации подземных вод.

Различия в природных условиях залегания гидрогенных месторождений и ценности заключенных в них подземных вод требуют дифференцированного подхода к обоснованию природоохранных мероприятий и соответственно к выбору способов рекультивации горизонтов [5].

Подземное выщелачивание – по существу безотходное производство, осуществляемое на месте залегания рудных тел без производства горных работ, нарушающих существующие природные условия недр и поверхности. В отличие от подземных и открытых горных работ здесь нет отвалов пород и хвостохранилищ, не происходит осушение водоносных горизонтов, нет шахтных и сбросных вод, загрязняющих поверхность, атмосферу и источники водоснабжения. Поэтому подземное выщелачивание влияет на состояние окружающей среды по сравнению с горным способом значительно меньше.

На многих опытных и промышленных участках установлено, что после прекращения процесса добычи в водоносных горизонтах, вмещающих ореолы остаточных растворов, происходит хотя и медленная, но необратимая нейтрализация продуктов подземного скважинного выщелачивания в подземных водах [6].

В настоящее время несколько стран, имеющие на своей территории месторождения урана, отрабатываемые методом подземного выщелачивания, решают различные задачи по рекультивации подземных вод. В Чехии и Болгарии закисленные рудные горизонты находятся в непосредственной близости от водозаборных скважин [7, 8]. Содержание сульфатов некоторых участках достигает 12-15 г/л [9]. Зачастую, даже несмотря на то, что полигоны подземного выщелачивания находятся на значительном удалении от населенных пунктов, загрязнение может распространяться со скоростью десятки метров в год и с течением времени достигнуть их [10].

Общепринятой схемой по рекультивации подземных вод является схема состоящая из следующих этапов: откачка загрязненных растворов из подземного горизонта, обработка данных растворов методом обратного осмоса с добавлением нейтрализующих реагентов и возврат в систему, принудительная циркуляция растворов для получения однородной среды в зоне выщелачивания [11, 12]. Первые два этапа были относительно успешно проведены в США на трех месторождениях в Texace [13]. Однако вернуть водоносный горизонт в исходное состояние так и не удалось [14].

Очистка остаточных растворов от искусственных и петрогенных техногенных веществ на поверхности методами химических технологий приведет к масштабному загрязнению дневной поверхности и лишит ПСВ главного экологического преимущества по сравнению с открытым и подземным горными способами разработки урановых месторождений [15]. В Республике Казахстан согласно [16] в подземных водах продуктивного горизонта должна быть погашена избыточная кислотность и приняты меры по ликвидации ореола загрязненных вод.

В процессе проведения рекультивационных работ одним из вариантов ускорения восстановления окружающей среды может являться нейтрализация щелочными растворами непосредственно на месте залегания отработанного рудного горизонта уранового месторождения. В настоящей статье представлены результаты исследования восстановления рудного горизонта отработанных урановых месторождений РК и его сорбционных свойств по отношению к техногенным радионуклидам.

Анализ химического и радионуклидного состава отобранных проб кернового материала

Для проведения исследований был взят образец кернового материала одного из урановых месторождений Южно-Казахстанской области. Начальный вес материала – 2500 г. Порода рыхлая, сухая, сыпучая. Цвет светло-сероватый, со слабым зеленоватым и дымчатым оттенком, встречаются светло-желтые разности. Состав кварцево-глинисто-слюдистый. Поровый объем кернового материала (Q_n) составляет 20 %.

Усреднение осуществлялось методом сбрасывания на конус. В таблице 1 представлен химический состав усредненной пробы урановой руды.

		T 7 U				~		
Тарина	_	химическии	COCTAR	VC	релненнои	прооы	урановои	пулы
1 moninger 1			cocrab	<i>J</i> •	редненнон	npoobi	jpunobon	руды

Содержание, %										
SiO ₂	Al ₂ O ₃	K ₂ O	Fe ₂ O ₃	Na ₂ O	MgO	CaO	TiO ₂	S _{of}	С об	U
79,73	1,24	1,42	0,40	0,12	0,12	0,03	0,02	0,15	0,06	0,03



Рисунок 1 – Исходная усредненная проба урановой руды

Для диагностирования соединений, из которых состоит исследуемая проба урановой руды, провели рентгенодифрактометрический и рентгенофазовый анализы.

Рентгенодифрактометрический анализ был проведен на автоматизированном дифрактоме-

тре ДРОН-3 с СиКа-излучением, β-фильтр. Условия съемки дифрактограмм: U=35 кВ; I=20 мА; съемка θ-2θ; детектор 2 град/мин.

Рентгенофазовый анализ на полуколичественной основе выполнен по дифрактограммам порошковых проб с применением метода равных навесок и искусственных смесей. Определялись количественные соотношения кристаллических фаз.

Результаты рентгенофазового анализа приведены в таблице 2.

Таблица 2 - Результаты рентгенофазового анализа

Минерал	Формула	Концентрация, %
кварц	SiO ₂	66
калиевый полевой шпат	KAlSi ₃ O ₈	28
альбит	NaAlSi ₃ O ₈	5
кальцит	CaCO ₃	<0,5

Гранулометрический анализ образца пробы проведен путем его деления на шесть классов крупности. Результаты анализа приведены в таблице 3.

Опыты по выщелачиванию проводили в трубках с длиной рабочей части 490 мм и внутренним диаметром 34 мм, расположенных в горизонтальном положении, куда раствор подавался сверху вниз. Навеска руды составляла 500 г. Скорость фильтрации в опытах устанавливалась равной 500 мл/сут, что соответствует 1 л/ (кг×сут), т.е. за 1 сутки достигался Ж:Т=1 л/кг.

Керновый материал последовательно промывался водой в соотношении Ж:T=1, затем 2 %-ным раствором H_2SO_4 (Ж:T=1) и далее 1 %-ным раствором H_2SO_4 (Ж:T=3).

Схема установки для проведения опыта с постоянной скоростью фильтрации в трубке приведена на рисунке 2.

|--|

№№ п/п	Размеры класса, мм	Выход класса, г	Выход класса, %
1	>5,0-+2,0	53,20	7-8%
2	- 2,0 - + 1,0	21,90	3%
3	- 1,0 - + 0,5	78,50	10–11%
4	- 0,5 - + 0,25	345,00	45-47%
5	- 0,25-+0,05	245,20	32–34%
6	- 0,05-+0	20,75	2,5–2,7%

По данным таблицы 3 видно, что усредненная проба урановой руды в значительной степени (45–47%) представлена классом (- 0,5) – (+ 0,25) мм.



1 – сосуд Мариотта с рабочим раствором; 2 – гибкий шланг (из кислотостойкой резины или силикона);
 3 – штатив; 4 – бюретка с делениями; 5 – кран; 6 – трубка; 7 – керновый материал; 8 – пористый фильтр;
 9 – колба с продуктивным раствором; 10 – подставка с регулируемой высотой ножек.

Рисунок 2 – Схема установки для проведения опытов по выщелачиванию в трубке с постоянной скоростью фильтрации

Применение бюретки с делениями и двух независимых кранов позволяет точно регулировать скорость фильтрации. При этом в случае изменения фильтрационных свойств руды общая скорость фильтрации остается постоянной. Наличие крышек на бюретке и колбе с продуктивным раствором предотвращает испарение рабочего и продуктивного растворов, пористый фильтр предотвращает загрязнение продуктивного раствора механическими взвесями и одновременно служит уплотнителем.

Порядок работы устанавливался следующим: после сборки установки ножки подставки 10 регулировались так, чтобы трубка 6 была наклонена под углом 4-5° к горизонту (входная сторона ниже выходной), в результате чего гарантируется отсутствие появления воздушных «мешков» при подаче рабочего раствора. Затем, при закрытом нижнем кране 5, верхний кран 5 открывается и с помощью часов определяется скорость подачи рабочего раствора в бюретку 4. После того, как скорость подачи рабочего раствора будет точно отрегулирована с помощью верхнего крана, нижний кран полностью открывается, и рабочий раствор начинает поступать в трубку. При этом фиксируется изменение уровня раствора в бюретке. Если уровень раствора повышается почти до верхнего края бюретки, с помощью штатива 3 бюретка и верхний кран поднимаются на большую высоту в пределах, ограниченных высотой штатива и длиной гибких шлангов 2. Время появления в колбе 9 продуктивного раствора фиксируется, после чего ножки подставки 10 регулируются так, чтобы трубка приняла горизонтальное положение. Продуктивный раствор анализируется ежесуточно, причем с целью контроля точности регулировки подачи рабочего раствора его объем измеряется, и в случае необходимости скорость подачи рабочего раствора корректируется.

Корректировка pH раствора в поровом пространстве отработанных кернов и определение сорбционных свойств пород по отношению к техногенным радионуклидам

После завершения эксперимента по выщелачиванию урана из керна и доведения уровня pH раствора в поровом пространстве до значения ~ 1,5, через руду по схеме, указанной на рисунке 3, подавали 0,5 %-ный раствор NaOH объемом 700 мл с радиоактивным трассером. В качестве трассера был выбран Cs-134, активностью 700 Бк. Скорость фильтрации составляла 50 мл/час. Пробы для проведения спектрометрического анализа и замера уровня pH отбирали каждый час.



1 – емкость с щелочным раствором,
 2 – перистальтический насос; 3 – шланг;
 4 – трубка с керновым материалом;
 5 – приемник фильтрат

Рисунок 3 – Схема установки для проведения опыта с принудительной фильтрацией

Данные по изменению уровня **рН в фильтра**те представлены на рисунке 4.



Рисунок 4 – Зависимость изменения рН в растворе

Из представленного графика видно, что оптимальным объем 0,5 %-ного раствора щелочи для нейтрализации кислотной среды подземного рудного горизонта составляет порядка 10 поровых объемов.

Результаты спектрометрического анализа фильтрата (NaOH) приведены в таблице 4

Образец	Масса, г	А (Cs-134), Бк/ образец
N-5	51	$0,37 \pm 0,04$
N-6	50,5	$0,\!28 \pm 0,\!04$
N-7	50,5	$0,21 \pm 0,03$
N-8	50	$0,18 \pm 0,02$
N-9	50	0,15 ± 0,03
N-10	50	$0,12 \pm 0,03$
N-11	50	$0,12 \pm 0,02$
N-12	50	$0,07\pm0,02$
N-13	50	$0,10 \pm 0,02$
N-14	50	$0,07 \pm 0,02$
N-15	50	$0,12 \pm 0,03$
N-16	50	$0,07 \pm 0,02$
N-17	49	$0,04 \pm 0,02$

Таблица 4 – Результаты спектрометрического анализа фильтрата

Из представленных данных видно, что, керновый материал хорошо сорбирует на себя Сs-134 и большая часть активности (~99%) остается в рудном горизонте. При этом наилучшую сорбционную способность продемонстрировал образец №2, что объясняется тем, что цезий может входить в структуру таких минералов, как силикаты, алюмосиликаты и гидрослюды, причем степень его фиксации в почве возрастает с течением времени [17]. Наличие кварцевого песка в породе также снижает степень выщелачивания цезия [18].

Согласно исследованиям [19,20], технологические процессы способствуют увеличению сорбционных свойств пород и прочности закрепления на минеральных зернах радионуклидов в глубинных хранилищах жидких технологических РАО. С увеличением времени взаимодействия кислые технологические отходы с породой доля прочнофиксированных форм возрастает.

Учитывая, что объем рудного тела среднестатистического отработанного технологического блока составляет порядка 300 тыс. м³, для утилизации очищенного натрия І-го контура РУ БН-350 будет достаточно площади одного отработанного технологического блока (площадь контура рудного тела ~44 тыс. кв.м.).

Заключения и выводы

Полученные результаты свидетельствуют, что самовосстановление среды отработанных урановых месторождений может быть в значительной мере ускорено с помощью нейтрализации щелочью, в том числе с использованием очищенного натрия I-го контура реакторной установки БH-350.

Литература

1 Щеточкин В.Н., Кисляков Я.М. Экзогенно-эпигенетические урановые месторождения Кызылкумов и сопредельных районов // Геология рудных месторождений. –1993. – Т. 5, №3. – С. 222-245.

2 Берикболов Б.Р. Месторождения урана Казахстана: справочник. – Алматы: РГП ПХВ «Информационныйаналитический центр геологии и минеральных ресурсов РК», 2005. – 220 с.

3 Петров Н.Н., Язиков В.Г., Аубакиров Х.Б., Плеханов В.Н., Вершков А.Ф., Лухтин В.Ф. Урановые месторождения Казахстана: (экзогенные). – Алматы: Гылым, 1995. – 264 с.

4 Батулин С.Г., Головин Е.А., Зеленова О.И. и др. Экзогенные эпигенетические месторождения урана. Условия образования. – М: Атомиздат. – 1965. – С. 308.

5 Сабирова Л.Б. Теория и методы оценки надежности восстановления пластовых вод после ПСВ урана. Монография. – Алматы, 2005. – 154 с.

6 Язиков В.Г., Забазнов В.Л. Вопросы геоэкологии при подземном скважинном выщелачивании урана // Горный информационно-аналитический бюллетень (научно-технический журнал), Москва. – 2003. – С. 237.

7 Andel P., Priban V. Environmental restoration of uranium mines and mills in the Czech Republic // Planning for environmental restoration of radioactively contaminated sites in central and eastern Europe. 1996. Vol.1. – P.113-135.

8 Vapirev E. I., Dimitrov M., Minev L., Boshkova T., Pressyanov D. S., Guelev M. G. Radioactively contaminated sites in Bulgaria // Planning for environmental restoration of radioactively contaminated sites in central and eastern Europe. -1996. - Vol. 1 - P.43-63.

9 Dimitrov M., Vapirev E. I. Uranium Industry in Bulgaria and Environment: Problems and Specific Features of the Period of the Technical Close-Out and Remediation of the Negative Consequences // Planning for environmental restoration of radioactively contaminated sites in central and eastern Europe. – 1996. – Vol.2. –P.43-52.

10 Molchanov A., Soroka Y., Isayeva N., Mordberg E. The State of Environment on Former Site of In-Situ Leaching of Uranium // Proc. of the Fifth Inter. Conf. on Radioactive Waste Management and Environmenttal Remediation. – 1995. – Vol.2 – P.1507-1510. 11 Schmidt C. Groundwater Restoration and Stabilization at the Ruth-ISL Test Site in Wyoming, USA // Proc. of a Technical Committee Meeting, IAEA-TECDOC-492 – 1989. – P.97-126.

12 Catchpole G., Kirchner G. Restoration of Groundwater Contaminated by Alkaline In-Situ Leach of Uranium Mining // Uranium Mining and Hydrogeology. – 1995. – P.81-89.

13 Mays W. M. Restoration of Groundwater at Three In- Situ Uranium Mines in Texas. // Uranium in situ leaching. Proc. of a Technical Committee Meeting held in Vienna, 5-8 October 1992, IAEA-TECDOC-720–1993. – P.191-215.

14 Otton J.K. Hall In-situ recovery uranium mining in the United States: Overview of production and remediation issues, Intern. Symp. on Uranium Raw Material for the Nuclear Fuel Cycle: Exploration, Mining, Production, Supply and Demand, Economics and Environmental Issues (URAM 2009), Vienna, 22-26 June. – 2009.

15 Поезжаев И.П., Полиновский К.Д., Горбатенко О.А., Панова Е.Н., Буленова К.Ж., Карманов Е.М., Блынский П.А., Битовт О.А. Геотехнология урана: учебное пособие. – Алматы, 2017. – С. 204 – 210

16 Санитарные правила ликвидации, консервации и перепрофилирования предприятий по добыче и переработке радиоактивных руд (СП ЛКП – 98), № 5.01.012.98*.

17 Prozorov L.B., Komarova N.I., and Molchanova T.V. Acid Deactivation of Soils with Ammonium Fluoride To Remove 137Cs // Radiokhimiya. – 2002. – Vol. 4, No. 5. – P. 470.

18 Николаев А.Н., Карлин Ю.В., Юрченко А.Ю. Особенности радиоактивного загрязнения бетона и возможности его дезактивации от изотопа Cs137 // Тезисы докладов 7й междун. научно-техн. конф. «Безопасность, эффективность и экономика атомной энергетики», Москва. – 2010. – С.260.

19 Власова И.Э., Захарова Е.В., Волкова А.Г., Калмыков С.Н. Микрораспределение и формы нахождения плутония, урана, америция и нептуния в осадочных породах пласта-коллектора в глубинных хранилищах жидких РАО // Российская конф. «Фундаментальные аспекты безопасного захоронения РАО в геологических формациях», Москва. – 2013. – С.26.

20 Захарова Е.В., Зубков А.А.2, Родыгина Н.И., Волкова А.Г., Прошин И.М.,

Данилов В.В., Макарова О.В. влияние техногенных преобразований на поведение радионуклидов при захоронении жидких технологических отходов // Российская конф. «Фундаментальные аспекты безопасного захоронения РАО в геологических формациях», Москва– 2013. – С.47.

References

1 V.N. Shetochkin and Ya.M. Kislyakov, Geologiya rudnyx mestorozhdenij, 5, 3, 222-245, (1993) (in russ).

2. B.R. Berikbolov, Mestorozhdeniya urana Kazakhstana: spravochnik. (Almaty: RGP PKHV «Informatsionnyy-analiticheskiy tsentr geologii i mineral'nykh resursov RK, 2005), 220 p. (in Russ).

3. N.N. Petrov, V.G. Yazikov, X.B. Aubakirov, L.N. Petrov, V.N. Plekhanov, A.F. Vershkov, and V.F. Lukhtin, Uranovye mestorozhdeniya Kazakhstana (Almaty: Gylym, 1995), 264 p. (in Russ).

4. S.G. Batulin, Ye.A. Golovin, O.I. Zelenova at al, .Ekzogennye epigeneticheskie mestorozhdeniya urana, usloviya obrazovaniya (Moskow: Atomizdat, 1965) 308 p. (in Russ).

5. L.B. Sabirova, Teorija i metody ocenki nadezhnosti vosstanovlenija plastovyh vod posle PSV urana (Monografija, Almaty, 2005), 154 p. (in Russ).

6. V.G. Jazikov and V.L. Zabaznov, Gornyj informacionno-analiticheskij bjulleten' (nauchno-tehnicheskij zhurnal), Moskva, 237 p. (2003). (in Russ).

7. P. Andel and V. Priban, Planning for environmental restoration of radioactively contaminated sites in Central and Eastern Europe, 1, 113-135, (1996).

8. E.I. Vapirev, M. Dimitrov, L. Minev, T. Boshkova, D.S. Pressyanov, and M. G. Guelev, Planning for environmental restoration of radioactively contaminated sites in Central and Eastern Europe, 1, 43-63, (1996).

9. M. Dimitrov and E. I. Vapirev, Planning for environmental restoration of radioactively contaminated sites in Central and Eastern Europe, 2, 43-52, (1996).

10. A. Molchanov, Y. Soroka, N. Isayeva, and E. Mordberg, Proc. of the 5th Intern. Conf. on Radioactive Waste Management and Environmenttal Remediation, ICEM'95, Vol.2. Management of Low-Level Waste and Remediation of Contaminated Sites and Facilities, (ASME, New York, 1995), p.1507-1510.

11. C. Schmidt, Proc. of a Technical Committee Meeting (IAEA- TECDOC-492, Vienna 1989), p.97-126.

12. G. Catchpole and Kirchner G., Restoration of Groundwater Contaminated by Alkaline In-Situ Leach of Uranium Mining. Uranium Mining and Hydrogeology, (GeoCongress 1, Köln, 1995) p.81-89.

13. W.M. Mays, Proc. of a Technical Committee Meeting (Vienna, 5-8 October 1992), p.191-215.

14. J.K. Otton and S. Hall, Intern. Symposium on Uranium Raw Material for the Nuclear Fuel Cycle: Exploration, Mining, Production, Supply and Demand, Economics and Environmental Issues (Vienna, 22-26 June, 2009)

15. I.P. Poezzhaev, K.D. Polinovskiy, O.A. Gorbatenko, E.N. Panova, K.Zh. Bulenova, E.M. Karmanov, P.A. Blynskiy and O.A. Bitovt, Geotexnologiya urana (uchebnoe posobie, Almaty, 2017), p.204-210.

16. Sanitary rules for the liquidation, conservation and re-profiling of enterprises for the extraction and processing of radioactive ores (N_{2} 5.01.012, 1998). (in Russ).

17. L.B. Prozorov, N.I. Komarova, and T.V. Molchanova, Radiokhimiya, 4, 470, (2002).

18. A.N. Nikolaev at al., Sedmaya mejdunarodnaya nauchno-tehnicheskaya konf. «Bezopasnost, effektivnost i ekonomika atomnoi energetiki (Moscow, 2010), p.260. (in Russ).

19. I.E. Vlasova at al., Rossijskaya konf. «Fundamentalnye aspekty bezopasnogo zaxoroneniya rao v geologicheskix formaciyax», (Moscow, 15-16 October, 2013), p.26. (in Russ).

МРНТИ 34.05.93

Жумадилов К.Ш.^{1*}, Иванников А.И.², Степаненко В.Ф.², Скворцов В.Г.², Тойода Ш.³, Хоши М.⁴

¹Международная кафедра ядерной физики, новых материалов и технологий, Евразийский Национальный университет им. Гумилева Л.Н, Казахстан, Астана ²МРНЦ им. А.Ф. Цыба – филиал ФГБУ «НМИРЦ» Минздрава России, Обнинск ³Университет Науки Окаямы, Япония, Окаяма ⁴Университет Хиросимы, Япония, Хиросима ^{*}e-mail: zhumadilovk@gmail.com

ИССЛЕДОВАНИЕ НАСЕЛЕНИЯ ГОРОДА СТЕПНОГОРСКА, Расположенного в непосредственной близости от ураноперерабатывающего завода

В статье приведены результаты оценки возможного превышения поглощенной дозы, полученной работниками ураноперерабатывающего завода. Оценивалась возможная избыточная доза работников в сравнении с дозой населения (г. Степногорск) и дозой контрольного населения (г. Астана). Все образцы зубной эмали были извлечены в соответствии с медицинскими рекомендациями. Всего было отобрано 27 образцов эмали зубов у жителей города Степногорска (180 км от г. Астана, Казахстан). 6 образцов зубной эмали были отобраны у работников ураноперерабатывающего завода. Результаты оценки дозы по 6 образцам зубной эмали показывают небольшое влияние условий труда на рабочих, максимальная избыточная доза составляет менее 100 мГр. Аварийные (избыточные) дозы рабочих завода оказались ниже доз населения города Степногорска и доз жителей города Астана. Это пилотное исследование оценки дозы ЭПР зубной эмали, и для окончательного вывода требуется дополнительная выборка. **Ключевые слова:** ЭПР-дозиметрия, зубная эмаль, доза радиации, Степногорск.

> Zhumadilov K.Sh.^{1*}, Ivannikov A.I.², Stepanenko V.F.², Skvortsov V.G.², Toyoda S.³, Hoshi M.⁴ ¹International Department of Nuclear Physics, New Materials and Technology, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Kazakhstan, Astana ²A.F. Tsyb Medical Radiological Research Center, Obninsk, Russia ³Department of Applied Physics Faculty of Science Okayama University of Science, Japan

> ⁴Hiroshima University, Japan *e-mail: zhumadilovk@gmail.com

Investigation of Stepnogorsk city population residing near uranium processing plant

In the article the results of an estimation of possible excess of the absorbed dose received by workers of uranium-processing plant are included. The possible excess of dose of workers was evaluated with comparison with population set (Stepnogorsk) and control set (Astana city). All measured tooth enamel samples were extracted according to medical recommendations. Totally 27 tooth enamel samples were analyzed from the residents of Stepnogorsk city (180 km from Astana city, Kazakhstan). 6 tooth samples were collected from the workers of uranium processing plant. The results of 6 tooth enamel dose estimation show us a slight influence of working conditions to workers, the maximum excess dose is less than 100 mGy. The emergency (excess) doses of processing plant workers turned out to be lower than the doses of the population of Stepnogorsk city and the doses of residents of Astana city. This is pilot study of tooth enamel EPR dose estimation and for a final conclusion additional sample is required.

Key words: EPR dosimetry, tooth enamel, the radiation dose, Stepnogorsk.

Жумадилов К.Ш.^{1*}, Иванников А.И.², Степаненко В.Ф.², Скворцов В.Г.², Тойода Ш.³, Хоши М.⁴

¹Ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялар халықаралық кафедрасы, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Қазақстан, Астана ²Ресей Федерциясының Денсаулық сақтау Министрлігінің «ҒМЗО» Федералдық Мемлекеттік бюджеттік мекемесінің филиалы А.Ф. Цыб атындағы МРҒО, Обнинск ³Окаяма Ғылым Университеті, Жапон, Окаяма ⁴Хиросима Университеті, Жапон, Хиросима ^{*}e-mail: zhumadilovk@gmail.com

Уран өңдеу зауытына жақын орналасқан Степногорск қаласының халқын зерттеу

Мақалада уран өндіруші зауыт жұмыскерлерімен алынған сіңірілген мөлшерден мүмкін асырылуын бағалау нәтижелері келтірілген. Жұмыскерлердің мүмкін артық мөлшері тұрғындар мөлшерімен (Степногорск қ.) және бақылау тұрғындары мөлшерімен (Астана қ.) салыстырылып бағаланды. Тіс эмальінің барлық үлгілері медициналық талаптарға сәйкес алынды. Степногорск қаласы (Астана қаласынан 180 км, Қазақстан) тұрғындарынан тіс эмальінің барлығы 27 үлгісі жинап алынды. 6 тіс эмальі үлгілері уран өндіруші зауат жұмыскерлерінен жинап алынды. 6 тіс эмальі үлгілері бойынша мөлшерді бағалау нәтижелері жұмыскерлерге еңбек жағдайының азғана әсерін көрсетеді. Максималды артық мөлшер 100мГр-нан аз мөлшерді құрайды. Зауыт жұмыскерлерінің төтенше (артық) мөлшері Степногорск қаласы тұрғындары мөлшері мен Астана қаласы тұрғындары мөлшерінен төмен болып шықты. Бұл тіс эмальінің электронды парамагнитты резонанс (ЭПР) мөлшерін бағалау сынама зерттеуі, және соңғы қорытындыға қосымша іріктеу қажет.

Түйін сөздер: ЭПР-дозиметриясы, тіс эмалі, радиация дозасы, Степногорск.

Введение

Урановые ресурсы Республики Казахстан составляют около 1,6 миллиона тонн, содержащих около 19% разведанных запасов в мире. Разведанные месторождения на территории Казахстана отличаются с точки зрения практической ценности. Они сгруппированы в шесть урановых провинций. Одним из них является город Степногорск, находящийся в Акмолинской области. Он был основан в 1959 году и расположен в 180 км к северо-востоку от города Астаны (столица Казахстана). Степногорск был основан в качестве секретного города с кодовыми названиями Целиноград-25, Макинск-2. Основным направлением специализации города является обогащение урановой руды. В городе есть также и более мирные предприятия, такие как подшипниковый завод и другие [1].

ЭПР (электронно-парамагнитный резонанс) спектроскопия является одним из инструментов для ретроспективной реконструкции дозы [2-7]. Этот метод может оценить индивидуальные поглощенные дозы более чем через 50 лет после радиационного воздействия. ЭПР дозиметрия измеряет количество радикалов, образованных в зубной эмали после облучения ионизирующим излучением. Порог обнаружения поглощенной дозы этого метода является относительно низким, т.е. приблизительно 50 мГр [8, 9].

Материалы и методы

Отбор образцов осуществлялся учеными Казахстана, Японии и России у населения города Степногорска, включая работников Гидрометаллургического завода (ГМЗ), который занимается переработкой урана. С этой целью было собрано 27 образцов зубов, 6 из них были удалены у работников ГМЗ. Далее отобранные образцы были поделены на щечную и языковую части. Щечная часть не была включена в процедуру оценки дозы, поскольку их положение в полости рта не исключает возможности воздействия солнечного света, который может повлиять на сигнал ЭПР [2, 10-12]. 5 образцов зубов, были собраны в качестве контроля у населения города Астаны, который не подвергался какому-либо радиоактивному воздействию, вследствие его удаленности. Согласно информации, полученной с помощью опросников доноров, образцы зубов не были подвергнуты процедуре рентгеновского облучения челюсти.

Обработка ЭПР спектров. Все измерения проводились при комнатной температуре 21°С с помощью ЭПР-спектрометра Х-диапазона JEOL JES-FA100, оборудованным цилиндрическим резонатором TE011 высокой добротности, модели ES-UCX2. Для записи спектра использовались те же параметры, что и в работах, опубликованных ранее [13-15]. Возраст формирования зубной эмали получали путем вычитания среднего возраста формирования зубов для данной позиции зуба от возраста человека на момент измерения. Возраст формирования зубной эмали определяли по данным предыдущих публикаций [2, 3].

Программное обеспечение GraphPad Software (InStat 3,10, штат Калифорния, США) использовали для проведения статистического анализа).

Избыточная доза вызванная ионизирующим излучением (вероятно, из-за условий работы) была определено путем вычитания вклада от естественного фонового излучения (уравнение 1)

$$D_{ox} = D_{on} - TA * D_{b}, \tag{1}$$

где D_{en} является поглощенная доза была рассчитана с помощью программного обеспечения оценки (мГр), TA – это возраст зубной эмали (лет), и D_b – значение фоновой дозы, т.е. 0.8 мГр/год [16, 17]. Соответствующая погрешность определения дозы была определена на основе полуэмпирической формулы, используемой в [18].

Результаты и обсуждение

Поглощенные дозы с их погрушностями, были получены в результате обработки спектров. Для того, чтобы свести к минимуму влияние любого неизвестного рентгенодиагностического вклада в дозу, только результаты, полученные для языковой части были использованы для дальнейшего анализа.

Для жителей Степногорска (рис.1) аварийные дозы варьировались от -79 ± 26 до $279 \pm$ 43 мГр для жителей, а для работников ГМЗ от -70 ± 25 до 33 ± 26 мГр. Средняя аварийная доза для контрольных образцов зубов оценивается как 22 ± 26 мГр (рис.2). Разница между дозами контрольной группы (г. Астана) и доз в исследованных популяциях была протестирована на статистическую значимость с помощью статистического t-теста (программное обеспечение GraphPad). Для получения разности между средней ЭПР дозой для рабочих и населения Р-значение равно 0.22, и эта разница не является статистически значимой. Для образцов жителей города Степногорска и Астаны значение Р равно 0.5592 и также не является статистически значимым. Для жителей города Степногорск и города Астаны значение Р является 0.9155 и эта разница не является статистически значимой.





Учитывая небольшое количество исследованных образцов зубов, выведенные дозы не следует рассматривать в качестве представительских для рабочих ГМЗ. Максимальная доза, полученная для образцов жителей города Степногорска получены не из-за влияния перерабатывающего завода, но может быть получена от какого-то другого источника радиации. Другим объяснением высокой дозы для жителей Степногорска может быть миграция из различных населенных пунктов Казахстана, расположенных в непосредственной близости от Семипалатинского ядерного полигона.



Рисунок 2 – Средние аварийные дозы, определенные для различных групп населения: 1 – Жители Степногорска; 2 – работники ГМЗ; 3 – Жители Астаны.

Выводы

Результаты оценки дозы эмали зубов показывают небольшое влияние излучения от ураноперерабатывающего завода на работников. Эта небольшая разница была подтверждена статистическими расчетами. Это экспериментальное исследование оценки дозы ЭПР. В последующем исследовании больше внимания необходимо будет уделять сбору контрольных образцов зубной эмали.

Благодарности

Авторы статьи выражают искреннюю благодарность за финансовую поддержку из средств гранта Министерства образования и науки Республики Казахстан (5284/GF4 соглашение № 47).

Литература

1 Zhumadilov K., Ivannikov A., Stepanenko V., Abralina Sh., Sadvokasova L., Akilbekov A., Morzabayev A., Rakhypbekov T., Hoshi M. EPR pilot study on the population of Stepnogorsk city living in the vicinity of a uranium processing plant / Radiat. Environ. Biophys. – 2015. – 54. – P. 145-149.

2 IAEA Report. Use of electron paramagnetic resonance dosimetry with tooth enamel for retrospective dose assessment. Report of a coordinated research project / IAEA-TECDOC-1331. Vienna. – 2002.

3 Tanaka K., Endo S., Ivannikov A., Toyoda S., Tieliewuhan E., Zhumadilov K., Miyazawa C., Suga S., Kitagawa K., Hoshi M. Study on influence of X-ray baggage scan on ESR dosimetry for SNTS using human tooth enamel / J. Radiat. Res. – 2006. – 46. – P. 435-442.

4 Wieser A., Vasilenko E., Fattibene P., Bayankin S., El-Faramawy N., Ivanov D., Jacob P., Knyazev V., Onori S., Pressello M.C., Romanyukha A., Smetanin M., Ulanovsky A. Comparison of EPR occupational lifetime external dose assessments for Mayak nuclear workers and film badge dose data / Radiat. Environ. Biophys. – 2006. – 44. – P. 279-288.

5 Hoshi M., Toyoda S., Ivannikov A., Zhumadilov K., Fukumura A., Apsalikov K., Zhumadilov Z.S., Bayankin S., Chumak V., Ciesielski B., De Coste V., Endo S., Fattibene P., Ivanov D., Mitchell C.A., Onori S., Penkowski M., Pivovarov S.P., Romanyukha A., Rukhin A.B., Schultka K., Seredavina T.A., Sholom S., Skvortsov V., Stepanenko V., Tanaka K., Trompier F., Wieser A. and Wolakiewicz G. Interlaboratory comparison of tooth enamel dosimetry on Semipalatinsk region: Part 1, General View / Radiat. Meas. – 2007. – 42. – P. 1005-1014.

6 Ivannikov A., Toyoda S., Hoshi M., Zhumadilov K., Fukumura A., Apsalikov K., Zhumadilov Z.S., Bayankin S., Chumak V., Ciesielski B., De Coste V., Endo S., Fattibene P., Ivanov D., Mitchell C.A., Nalapko M., Onori S., Penkowski M., Pivovarov S.P., Romanyukha A., Rukhin A.B., Sanin D., Schultka K., Seredavina T., Sholom S., Skvortsov V., Stepanenko V., Tanaka K., Trompier F., Wieser A. and Wolakiewicz G. Interlaboratory comparison of tooth enamel dosimetry on Semipalatinsk region: Part 2, Effects of spectrum processing / Radiat. Meas. – 2007. – 42. – P. 1015-1020.

7 Zhumadilov K., Stepanenko V., Ivannikov A., Zhumadilov Z., Toyoda S., Tanaka K., Endo S. and Hoshi M. Measurement of absorbed doses from X-ray baggage examinations to tooth enamel by means of ESR and glass dosimetry / Radiat. Environ. Biophys. – 2008. 47. – P. 541-545.

8 Fattibene P., Wieser A., Adolfsson E., Benevides L.A., Brai M., Callens F., Chumak V., Ciesielski B., Della Monaca S., Emerich K., Gustafsson H., Hirai Y., Hoshi M., Israelsson A., Ivannikov A., Ivanov D., Kaminska J., Wu Ke, Lund E., Marrale M., Martens L., Miyazawa C., Nakamura N., Panzer W., Pivovarov S., Reyes R.A., Rodzi M., Romanyukha A.A., Rukhin A., Sholom S., Skvortsov V., Stepanenko V., Tarpan M.A., Thierens H., Toyoda S., Trompier F., Verdi E., Zhumadilov K. The 4th International Comparison on EPR Dosimetry with Tooth Enamel. Part 1: Report on the results / Radiat. Meas. – 2011. – 46. – P. 765-771.

9 Tielewuhan E., Ivannikov A., Zhumadilov K., Nalapko M., Tikunov D., Skvortsov V., Stepanenko V., Toyoda Sh., Tanaka K., Endo S., Hoshi M. Spectra processing at tooth enamel dosimetry: analytical description of EPR spectrum at different microwave power / Radiat. Meas. – 2006. – 41. – P. 410–417.

10 Sholom S., Desrosiers M., Chumak V., Luckyanov N., Simon S.L., and Bouville A. UV effect in tooth enamel and their possible application in EPR dosimetry with front teeth / Health Phys. – 2010. – 98. – P. 360-368.

11 Zhumadilov K.S., Ivannikov A.I., Skvortsov V.G., Zhumadilov Zh.S., Endo S., Tanaka K. and Hoshi M. Tooth enamel EPR dosimetry: selecting optimal spectra registration parameters and effects of sample mass on sensitivity / J. Radiat. Res. – 2005. – 46. – P. 435-442.

12 Ivannikov A.I., Sanin D., Nalapko M., Skvortsov V.G., Stepanenko V.F., Tsyb A.F., Trompier F., Zhumadilov K., and Hoshi M. Dental enamel EPR dosimetry: comparative testing of the spectra processing methods for determination of Radiation induced-signal amplitude / Health Phys. – 2010. – 98. – P. 345-351.

13 Zhumadilov K., Ivannikov A., Stepanenko V., Toyoda S., Zhumadilov Z. and Hoshi M. ESR dosimetry study of population in the vicinity of the Semipalatinsk Nuclear Test Site / J. Radiat. Res. – 2013. – 54. – P. 775-779.

14 Ivannikov A.I., Skvortsov V.G., Stepanenko V.F., Zhumadilov K.Sh. Comparative analysis between radiation doses obtained by epr dosimetry using tooth enamel and established analytical methods for the population of radioactively contaminated territories / Radiat. Prot. Dosim. – 2014. – 159. – P. 125-129.

15 Ivannikov A., Zhumadilov K., Tieliewuhan E., Jiao L., Apsalikov K.N., Berekenova G., Zhumadilov Zh., Toyoda Sh., Miyazawa C., Skvortsov V., Stepanenko V., Endo S., Tanaka K. and Hoshi M. Results of EPR dosimetry for population in the vicinity of the most contaminating radioactive fallout trace after the first nuclear test in the Semipalatinsk Test Site / J. Radiat. Res. -2006. -47. -P. A39-A46.

16 Zhumadilov K., Ivannikov A., Apsalikov K., Zhumadilov Zh., Stepanenko V., Skvortsov V., Berekenova G., Toyoda S., Endo S., Tanaka K., Miyazawa C. and Hoshi M. Results of tooth enamel EPR dosimetry for population living in the vicinity of the Semipalatinsk nuclear test site / Radiat. Meas. – 2007. – 42. – P. 1049-1052.

17 Zhumadilov K., Ivannikov A., Apsalikov K.N., Zhumadilov Zh., Toyoda Sh., Tieliewuhan E., Endo S., Tanaka K., Miyazawa C., Okamoto T. and Hoshi M. Radiation dose estimation by tooth enamel EPR dosimetry for residents of Dolon and Bodene / J. Radiat. Res. – 2006. – 47. – P. A47-A53.

18 Zhumadilov K, Ivannikov A., Zhumadilov Z., Stepanenko V., Apsalikov K., Rodzi M., Zhumadilova A., Toyoda S., Endo S., Tanaka K., Okamoto T. and Hoshi M. ESR dosimetry study on population of settlements nearby Ust-Kamenogorsk city, Kazakhstan / Radiat. Environ. Biophys. – 2009. – 48. – P. 419–425.

References

1 K. Zhumadilov, A. Ivannikov, V. Stepanenko, Sh. Abralina, L. Sadvokasova, A. Akilbekov, A. Morzabayev, T. Rakhypbekov, and M. Hoshi, Radiat. Environ. Biophys. 54, 145-149, (2015).

2 IAEA Report. Use of electron paramagnetic resonance dosimetry with tooth enamel for retrospective dose assessment. Report of a coordinated research project (IAEA-TECDOC-1331. Vienna, 2002).

3 K. Tanaka, S. Endo, A. Ivannikov, S. Toyoda, E. Tieliewuhan, K. Zhumadilov, C. Miyazawa, S. Suga, K. Kitagawa, and M. Hoshi, J. Radiat. Res. 46, 435-442, (2006).

4 A. Wieser, E. Vasilenko, P. Fattibene, S. Bayankin, N. El-Faramawy, D. Ivanov, P. Jacob, V. Knyazev, S. Onori, M.C. Pressello, A. Romanyukha, M. Smetanin, and A. Ulanovsky, Radiat. Environ. Biophys. 44, 279-288, (2006).

5 M. Hoshi, S. Toyoda, A. Ivannikov, K. Zhumadilov, A. Fukumura, K. Apsalikov, at al, Radiat. Meas. 42, 1005-1014, (2007).

6 A. Ivannikov, S. Toyoda, M. Hoshi, K. Zhumadilov, A. Fukumura, K. Apsalikov, Z.S. Zhumadilov, at al, Radiat. Meas. 42, 1015-1020, (2007).

7 K. Zhumadilov, V. Stepanenko, A. Ivannikov, Z. Zhumadilov, S. Toyoda, K. Tanaka, S. Endo, and M. Hoshi, Radiat. Environ. Biophys. 47, 541-545, (2008).

8 P. Fattibene, A. Wieser, E. Adolfsson, L.A. Benevides, M. Brai, F. Callens, V. Chumak, B. Ciesielski, at al, The 4th International Comparison on EPR Dosimetry with Tooth Enamel. (Part 1: Report on the results, Radiat. Meas. 46, 2011), p.765-771.

9 E. Tielewuhan, A. Ivannikov, K. Zhumadilov, M. Nalapko, D. Tikunov, V. Skvortsov, V. Stepanenko, Sh. Toyoda, K. Tanaka, S. Endo, and M. Hoshi, Radiat. Meas. 41, 410–417, (2006).

10 S. Sholom, M. Desrosiers, V. Chumak, N. Luckyanov, S.L. Simon, and A. Bouville, Health Phys. 98, 360-368, (2010).

11 K.S. Zhumadilov, A.I. Ivannikov, V.G. Skvortsov, Zh.S. Zhumadilov, S. Endo, K. Tanaka and M. Hoshi, J. Radiat. Res. 46, 435-442, (2005).

12 A.I. Ivannikov, D. Sanin, M. Nalapko, V.G. Skvortsov, V.F. Stepanenko, A.F. Tsyb, F. Trompier, K. Zhumadilov, and M. Hoshi, Health Phys. 98, 345-351, (2010).

13 K. Zhumadilov, A. Ivannikov, V. Stepanenko, S. Toyoda, Z. Zhumadilov, and M. Hoshi, J. Radiat. Res. 54, 775-779, (2013).

14 A.I. Ivannikov, V.G. Skvortsov, V.F. Stepanenko, K.Sh. Zhumadilov, Radiat. Prot. Dosim. 159, 125-129, (2014).

15 A. Ivannikov, K. Zhumadilov, E. Tieliewuhan, L. Jiao, K.N. Apsalikov, G. Berekenova, Zh. Zhumadilov, Sh. Toyoda, C. Miyazawa, V. Skvortsov, V. Stepanenko, S. Endo, K. Tanaka and M. Hoshi, J. Radiat. Res. 47, A39-A46, (2006).

16 K. Zhumadilov, A. Ivannikov, K. Apsalikov, Zh. Zhumadilov, V. Stepanenko, V. Skvortsov, G. Berekenova, S. Toyoda, S. Endo, K. Tanaka, C. Miyazawa, and M. Hoshi, Radiat. Meas. 42, 1049-1052, (2007).

17 K. Zhumadilov, A. Ivannikov, K.N. Apsalikov, Zh. Zhumadilov, Sh. Toyoda, E. Tieliewuhan, S. Endo, K. Tanaka, C. Miyazawa, T. Okamoto, and M. Hoshi, J. Radiat. Res. 47, A47-A53, (2006).

18 K. Zhumadilov, A. Ivannikov, Z. Zhumadilov, V. Stepanenko, K. Apsalikov, M. Rodzi, A. Zhumadilova, S. Toyoda, S. Endo, K. Tanaka, T. Okamoto. and M. Hoshi, Radiat. Environ. Biophys. 48, 419–425, (2009).

4-бөлім

КОНДЕНСИРЛЕНГЕН КҮЙ ФИЗИКАСЫ ЖӘНЕ МАТЕРИАЛТАНУ ПРОБЛЕМАЛАРЫ

Раздел 4

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ И ПРОБЛЕМЫ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ

Section 4

CONDENSED MATTER PHYSICS AND MATERIALS SCIENCE PROBLEMS FTAMP 29.03.35

Аймағанбетов К.П., Тоқмолдин Н.С.*

ЖШС «Физика техникалық институты», Қазақстан, Алматы, *e-mail: ntokmoldin@gmail.com

РЕЛАКСАЦИОНДЫ СПЕКТРОСКОПИЯ ӘДІСІМЕН КРЕМНИЛІ ДИОДТЫҢ ТЕРЕҢ ДЕҢГЕЙЛІ ПАРАМЕТРЛЕРІН ЗЕРТТЕУ

Жартылай өткізгішті материалдарда кездесетін дефектілер, құрылғының электрлі физикалық сипаттамаларына (өткізгіштік, заряд тасымалдаушылардың өмір сүру уақыты) орасан зор әсер етеді. Тыйым салу аймағында осындай құбылыстардың орналасуын – «терең деңгейлер» деп атайды. Дефектілер болмысына байланысты, өзіндік болуы мүмкін немесе арнайы белгілі бір үлгіні алу барысында, әр түрлі технологиялық факторлардың әсерінен пайда болуы мүмкін. Жартылай өткізгішті құрылғыларда кездесетін терең деңгейлердің параметрлерін (иондалу энергиясы, концентрациясы және ұстап алу көлденең қимасы) зерттеуге арналған бірден бір тиімді әдіс – релаксационды спектроскопия (ағылшынша: «deep level transient spectroscopy (DLTS)») әдісі болып табылады. Релаксационды спектроскопия әдістемесі тосқауылды құрылымды немесе р-п өткелдегі терең деңгейлердің параметрлерін зерттеу үшін қолданылады. Әдістің артықшылығы – оның өте жоғары сезімталдылығы болып саналады. Сонымен қатар, релаксационды спектроскопия әдісінің көмегімен зерттеулер жүргізу барысында, жартылай өткізгіштің энергетикалық тиым салынған аймағын толықтай зерттеуін қамтамасыз етеді. Әдістемені эксперименталды түрде орындау барысында DLS спектрометрдің көмегімен алынған кремнилі КД208А диодтың зерттеу нәтижелері көрсетілді.

Түйін сөздер: DLTS, терең деңгейлер, ұстап алу көлденең қимасы.

Aimaganbetov K.P., Tokmoldin N.S.* LLP «Physico-Technical Institute», Kazakhstan, Almaty, *e-mail: ntokmoldin@gmail.com Study of deep level parameters in a silicon diode using

Study of deep level parameters in a silicon diode using capacity-based deep level transient spectroscopy

Defects occurring in semiconductor materials have a significant impact on their electrophysical properties (conductivity, lifetime of charge carriers). In the case of energy levels of the defects being located within the band gap of these materials, far from the edges of the valence and conduction bands, they are also known as "deep levels". Defects appearing within the band gaps of semiconductor materials may be both intrinsic and result from external technological factors. Parameters characterizing deep levels include ionization energy, concentration and cross-section. These parameters may be comprehensively using capacity-based deep level transient spectroscopy («deep level transient spectroscopy» DLTS). The main advantage of this technique is its high sensitivity enabling to study the band gap structure in semiconductor materials. This paper describes the methodology of using deep level transient spectroscopy for the characterization of a KD208A silicon diode with the purpose of identifying and studying deep level characteristics in this device.

Key words: relaxation spectroscopy, deep level, capture cross-section.

Аймаганбетов К.П., Токмолдин Н.С.* ТОО «Физико-ехнический институт», Казахстан, Алматы, *e-mail: ntokmoldin@gmail.com

Исследование параметров глубоких уровней кремниевого диода методом релаксационной спектроскопии глубоких уровней

Дефекты, содержащиеся в полупроводниковых материалах, оказывают значительное влияние на их электрофизические параметры (проводимость, время жизни переносчиков заряда). В случае, если энергетические уровни дефектов расположены в запрещённой зоне указанных материалов, на значительном расстоянии от краев валентной зоны и зоны проводимости, они также известны под названием «глубокие уровни». Дефекты в структуре запрещённой зоны полупроводника могут быть как собственными, так и образовываться под влиянием внешних технологических факторов. Параметрами, которыми можно охарактеризовать глубокие уровни, являются энергия ионизации, концентрация и сечение захвата. Указанные параметры могут достаточно полно исследоваться методом емкостной релаксационной спектроскопии глубоких уровней (на английском: «deep level transient spectroscopy» DLTS). Преимуществом данной методики является ее высокая чувствительность, что даёт возможность подробно исследовать структуру запрещенной зоны в полупроводниковых материалах. В настоящей работе описана методика применения релаксационной спектроскопии глубоких уровней к исследованию кремниевого диода КД208А с целью идентификации и изучения характеристик глубоких уровней в данном элементе.

Ключевые слова: релаксационная спектроскопия, глубокий уровнь, сечение захвата.

Кіріспе

Технологиялық үрдіспенпен жасау кезінде, құрылымында пайда болатын ақаулар мен қоспалар, микро және ноноэлектронды элементтердің шығыс параметрлерінің тұрақсыздығына әкеліп соғады. Жартылай өткізгіштің немесе кристалдың тыйым салу аймағында энергетикалық түрде шектелген шектелген терең деңгейлерді, құрылымдық деффектілер мен қоспалар құрайды және оларды терең орталығы деп айтайды. Олар, құрылғылар мен материалдардың қасиетіне пайдалы немесе пайдасыз болуы мүмкін. Сондықтан, қазіргі таңдағы микро және нано элементтердің құрылымындағы энергетикалық терең деңгейлерді зертеу, физика саласында үлкен қызығушылықты туындатады.

Баръерлі құрылымды немесе р-п өткелді жартылай өткізгіштің терең деңгейлі параметрлерін зерттеуге арналған бірден бір тиімді әдіс – релаксационды спектроскопия әдісі болып саналады. 1974 жылы Д.В. Лэнг алғашқы болып, релаксационды спектроскопия (DLTS) әдісін ұсынды [1]. Аталынған әдістің жұмыс істеу принципі, жартылай өткізгіштің сиымдылық релаксациясын өлшуге негізделген және зерттеулер жүргізу барысында температураны өзгерте отырып, жартылай өткізгіштің зарядталған қосылу аймағындағы энергетикалық терең деңгейлерді, импульсті тұрақты кернеумен қоздыру арқылы орындалады [2-10]. Қазіргі таңда, релаксационды спектроскопия әдісінің бірнеше түрлері бар. Оларға зарядты (QDLTS), токты (CDLTS), оптикалы (ODLTS), екілік релаксационды (DDLTS) және Лаплас түрлендіргіші (LDLTS) спектроскопия әдістері жатады [2,10]. Соңғы жылдары релаксационды спектроскопия әдісінің жұмыс қызметінің жақсаруына байланысты, микро және наноқұрылымды жартылай өткізгіштерге зертеулер жүргізу қолданысына ие болды [11-13].

Релаксационды әдістің артықшылығы:

 терең деңгейлердегі заряд тасымалдаушылардың эмиссиясы мен ұстап алу қимасын оқып үйренуге мүмкіндік береді;

 дефектінің түрлері мен оның табиғатын зерттеуге мүмкіндік береді;

 иондалу энергиясы, ұстап алу қимасы және концентрациясы сияқты терең деңгейлердің параметрлерін анықтауға мүмкіндік береді [1, 2, 8].

Д.В. Лэнг ұсынған релаксационды спектроскопия әдісінің көмегімен зерттеулер жүргізу кезінде өзіндік кемшіліктері туындауы мүмкін. Атап айтсақ, компенсацияланған үлгілерді, яғни реласационды спектроскопия әдісімен зерттеулер жүргізу барысында сиымдылығы өзгермейтін жартылай өткізгіштерге, зерттеулер жүргізу мүмкіндігі болмайды. Себебі, кейбір зерттелінетін үлгілердің заряд тасымалдаушыларының концентрациясы аса көп болуы мүмкін. Сондықтан, мұндай жағдайларды токты спектроскопия (CDLTS) қолданылады [13-16]. Таңдалынған әр бір әдістің өзіндік ережелері мен қойылған шектеулеріне байланысты зерттеулер жүргізіледі.

Жұмыстың мақсаты – кремнилі КД208А диодының терең деңгейлі параметрлерін релаксациондны спектроскопия әдісінің көмегімен анықтау. Осыған орай зерттеу нәтижелерін алу барысында, жартылай өткізгішті материалдардың энергетикалы зоналық құрылымын оқып үйренуге толықтай мүмкіндік береді.

Зерттеу әдістемесі

Зерттеу үлгісі ретінде өндірістік кремнилі КД208А диоды қолданылды.

Кремнилі КД208А диодтың негізгі техникалық сипаттамалары төмендегі кестеде көрсетілген.

1-кесте – Кремнилі КД208А диодтың негізгі техникалық сипаттамасы

Диод атауы	U _{kepi(max)} , B	I _{max} , A	$v_{_{\mathrm{жұм.жиілігі}}},$ кГц
Д223А	100	1.5	1

Релаксационды спектроскопия әдісі DLSспектрометрдің көмегімен жүргізілді. Өлшеу құрылғысының принципиалды блок схемасы және жұмыс істеу принципі [17] жұмыста толықтай көрсетілген.

Экспериментті жүргізу барысында көзделінген нәтижелерді алу мақсатында кремнилі диодты 196 °С – тан 70 °С – қа дейін суытамыз. Көптеген дерек көздеріне сүйенсек, эксперименттер жүргізу барысында температураның өзгеру жылдамдығы $0,01\div0,5$ К/сек диапазонын сақтау керек екендігі ескертіледі [18, 19].

Зерттелініп отырған кремнилі диодқа -7 ÷ 0,2 В импулсті кернеу береміз.

Қысқа уақытты заряд тасымалдаушылармен толтыру импульсінің уақыт мерзімі 10 мс құрайды.

Зарядталған қосылу аймағына «-7 В» кері кернеу берген кезде, зертелініп отырған диодтың зарядталған қосылу аймағының ені ұлғаяды және сиымдылығы төмендейді. Демек, қарастырылып отырған аймақта, бос заряд тасымалдаушылары жоқ екенін біліреді. Содан кейін, «0,2 В» импульсін қосқанда, *p-n* өткелдің сиымдылығының артқанын байқаймыз. Осы кезде, зарядталған қосылу аймағының ені кішірейеді де және терең деңгейлер бос заряд тасымалдаушылармен толтырылады. Бұл құбылысты заряд тасымалдарын ұстап алу процессі деп атайды. Содан соң, импульсті кернеуді кенеттен мүлдем алып тастасақ, яғни, бастапқы қалпына келтірсек, сиымдылықтың экспоненциялды түрде өзгеруін көреміз. Осы сәтте, қалып қойған бос заряд тасымалдаушылары электр өрісінің әсерінен, терең деңгейлерден ыршып шығады. Бұл процессті – заряд тасымалдаушылардың эмиссиясы немесе сиымдылық релаксациясы деп атайды.

Зерттеу нәтижелері

Жартылай өткізгіштің сиымдылық релаксациясы температураға өте тәуелді болады және оның экспонениалды өзгеруі келесі өрнекпен анықталады:

$$C(t) = \Delta Cexp\left(\frac{-t}{\tau}\right), \tag{1}$$

 ΔC – импульс берілген кездегі сиымдылықтың өзгеруі, τ – тұрақты уақыт релаксациясы немесе уақыт жылдамдығы «rate window».

Терең деңгейлердің параметрлерін анықтау кезіндегі маңызды қадамы – DLTS спектрін тұрғызу болып табылады. DLTS спектрі *р-п* өткелдің сиымдылық релаксациясы, белгілі бір тұрақты уақыт реласациясына [t₁, t₂] қатысты өзгеруіне негізделген. Қажетті параметрлерді алу үшін тұрақты уақыт реласациясын [t₁, t₂] өзгерту арқылы бірнеше DLTS спектрін (5-б) тұрғызамыз. Сиымдылық релаксациясы DLSспектрометріндегі «Boxcar» функциясының көмегімен автоматты түрде өңделеді және электрлі сигнал ретінде коррелятордың шығысына келіп түседі. Келіп түскен сигналды аналогты-цифрлы түрлендіргіш құрылғысы арқылы арнайы дербес компьютерге жазылады [17].

Эксперименталды алынған нәтижелер LabVIEW бағдарламасының көмегімен DLTS спектрін тұрғызамыз және оларға есептеулер жүргіземіз.

Төмендегі 1-суретте эксперименталды түрде зерттеулер жүргізілген керемнилі КД208А диодтың әр түрлі тұрақты уақыт релаксациясымен алынған DLTS спектрлері көрсетілген.

Суретте байқағанымыздай, температураны -196 °С-тан 70 °С-қа дейін өзгерту кезінде 2 терең деңгей анықталды.

Әр бір алынған спектрдің экстремумы, белгілі бір терең деңгейдің шамасына тең болады. Әр бір жеке спектрдің экстремумы мен тұрақты уақыт релаксациясының шамасына қатысты Аррениус графигі тұрғызылады. Аррениус графигі 1000/T – ның $\ln(1/(\tau T^2))$ – ға қатынасы түрінде тұрғызылады.



1-сурет – Кремнилі КД208А диодтың DLTS спектрлері

Бұл жағдайда тангенс бұрышы арқылы терең деңгейлердің иондалу энергиясы ΔE_{TZ} анықталады. Ал ордината өсімен қиылысу арқылы – ұстап алу көлденең қимасының о

параметрі анықталады. Төмендегі 2 – суретте кремнилі КД208А диодтың терең деңгейлерінің параметрлерін анықтауға арналған Аррениус графигі көрсетілген.



Эксперименталды түрде алынған терең деңгейлер: а) Е1; б) Е2.

2-сурет – Кремнилі КД208А диодтың Аррениус графигі:

Терең деңгейлердің иондалу энергиясын $\Delta E_{_{7/2}}$ және ұстап алу көлденең қимасы σ параметрлерін анықтау үшін, термионды эмиссияға негізделген Ричардсон формуласы қолданылады [17]:

$$e_{n,p}(T) = \frac{1}{\tau} = AT^2 exp\left[-\frac{\Delta E_{\Gamma Y}}{kT}\right], \qquad (2)$$

мұндағы

$$A = \frac{4\sqrt{6}\sigma k^2 \pi^{3/2} m^*}{h^3},$$
 (3)

мұндағы, $e_{n,p}$ — эмиссия жылдамдығы, ΔE_{TA} — терең деңгелердің иондалу энергиясы, k — Больцман тұрақтысы, σ — ұстап алу қимасы, m^* — заряд тасымалдаушылардың орташа жылдамдығы.

(2) түрлендіру арқылы келесі өрнекті аламыз [1, 17]:

$$\ln\left(\frac{1}{\tau T^2}\right) = \ln(K\sigma) - \frac{\Delta E_{\Gamma Y}}{kT},$$
 (4)

ISSN 1563-034X

мұндағы

$$K = \frac{4\sqrt{6}k^2\pi^{3/2}m^*}{h^3}.$$
 (5)

Алынған (4) формуланың көмегімен – ΔE_{TZ} және σ параметрлерін анықтаймыз.

Төмендегі кестеде кремнилі КД208А диодтың эксперименталды алынған параметрлері көрсетілген.

2-кесте – Кремнилі КД208А диодтың негізгі параметрлері

Терең деңгей- лер	Иондалу энергиясы Е (эВ)	¥стап алу қимасы σ (см²)	Диодтың сыйымдылығы (77К-350К) ΔС (пФ)
E1	-0,24	2,73387*10 ⁻¹⁷ м ² 2,73387*10 ⁻¹³ см ²	- 0,30 ÷ 075
E2	0,39	1,64128*10 ⁻²⁰ м ² 1,64128*10 ⁻¹⁶ см ²	

Зерттеу нәтижелеріне тоқталатын болсақ, 1-суретте көрсетілгендей, екі терең деңгейді анықтадық. Е1 донорлы терең деңгейі -130 °С \div -30 °С температура диапазонында анықталды. Литературалық қорек көздеріне сүйенетін болсақ, Е1 терең деңгейі көміртегі атомының қоспасына сәйкес келеді деп жорамалдаймыз. [20] литературалық қорек көзі бойынша көміртегі қоспасы кремнилі материалында тек бір ғана донорлы деңгеймен кездескен (Е_t = E_c-0,25 эВ).

Е2 акцепторлы терең деңгейі -10 °С ÷ 70 °С температура диапазонында анықталды. Бұл энергетикалық деңгейді – оттегі атом қоспасы

болуы мүмкін деп жорамалдаймыз. Зи С.М. монографиясында [20] оттегі қоспасына байланысты көптеген дәлелдер көрсетілген. Және де Чохраль әдістемесімен кристалды өсіру процессі кезіндегі оттегінің кристаллға еніп, әр түрлі дефектілік жағдайларды тудыратыны жайлы да айтылған.

Осыған орай, эксперименталды алынған нәтижелерді қорытындылай отырып, айтылған дефектілер – локализацияланған, яғни, энергетикалы шектелген. Мұндай терең деңгейлер жартылай өткізгішті құрылғылардың электрлі физикалық сипаттамаларына әсер ететінін білеміз. Дефекттер, рекомбинациялы центр ретінде немесе белгілі бір тип тұзағы ретінде жұмыс істеуі мүмкін.

Қорытынды

Мақалада релаксационды спектроскопия әдісінің көмегімен кремнилі КД208А диодтың терең деңгейлі параметрлері зерттелді.

Зерттеу нәтижелеріне тоқталатын болсақ, экспериментті жүргізу барысында акцепторлы және донорлы терең деңгейлері анықталынды.

Мақалада негізгі алынған ақпараттар мен зерттеу нәтижелері, басқа авторлардың жүргізілген жұмыстарымен сәйкес келеді. Әдістеменің көмегімен анықталынған деффектілердің түрлері, жартылай өткізгішті құрылғылармен айналысатын жұмыс орындарына пайдалы ақпараттар беретініне толықтай сенімдіміз. Сонымен қатар, релаксационды спектроскопия әдісін оқып үйрену үшін, арнайы жоғарғы оқу орындарында зертханалық жұмыстар жүргізу үшін кешенді әдістемелер жасауға болады.

Әдебиеттер

1 Lang D.V. Deep level transient spectroscopy: a new method to characterize traps in semiconductors // J. Appl. Phys. – 1974. – Vol.45. – P.3023-3032.

2 Берман Л.С., Лебедев А.А. Емкостная спектроскопия глубоких центров в полупроводниках. – Л.: Наука, 1981. – 176 с.

3 Grimmeiss H.G., Ovren C. Fundamentals of junction measurements in the study of deep levels in semiconductors // J. Phys. E.: Scientific Instr. – 1981. – Vol.14, No.10. – P. 1032–1042.

4 Акчурин Р.К., Андрианов Д.Г., Берман Л.С. и др., Физика и материаловедение полупроводников с глубокими уровнями / Под ред. В.И. Фистуля. – М.: Металлургия, 1987. – 232 с.

5 Sah C.T., Forbes L., Rosier L.L., Tasch A.F. Thermal and optical emission and capture rates and cross sections of electrons and holes at imperfection centres in semiconductors from photo and dark junction current and capacitance experiments // Solid-State Electronics. – 1970. – Vol.13, No.8. – P. 759–788.

6 Lang D.V. Space charge spectroscopy in semiconductors / Thermally stimulated relaxation processes in solids // Ed. by P. Braunlich. New York: Springer-Verlag, 1979. – P. 93–133.

7 Johnson N.M., Deep-level transient spectroscopy: characterization and identification of electronic defects // Optical engineering. -1986. - N.5. - P.698-704.

8 Денисов А.А., Лактюшкин В.Н., Садофев Ю.Г. Релаксационная спектроскопия глубоких уровней // Обзоры по электронной технике, сер. технология, организация производства и оборудование. – М.: ЦНИИ "Электроника", 1985. – Вып. 15(144). – 52 с.

9 Farmer J.W., Nugent J.C. Transient current spectroscopy on neutron irradiated silicon // Neutron Transmutat. Doping Semicond.: Mater. Proc. 4th Neutron Transmutat. Doping Conf., Gaithersburg, Md, 1–3 June, 1982. New York, London, 1984. – P. 225– 239.

10 Кузнецов Н.И. Токовая релаксационная спектроскопия глубоких уровней (i-DLTS) // ФТП. – 1993. – Т.27. – Вып. 10. – С.1674-1679.

11 Schmalz K., Yassievich I.N., Rucker H., Grimmeis H.G. Characterization of Si/Si1 xGex/Si quantum wells by space-charge spectroscopy // Phys. Rev. B. – 1994. –Vol.50. – P.14287-14301.

12 Chretien O., Apetz R., Vescan L., Souifi A., Luth H., Schmalz K., Koulmann J.J. Thermal hole emission from Si/Si1-xGex/ Si quantum wells by deep level transient spectroscopy // J. Appl. Phys. – 1995. – Vol.78. – P.5439-5447.

13 Козловский В.И., Садофьев Ю.Г., Литвинов В.Г. Разрыв зон в структурах с одиночной квантовой ямой Zn1-xCdxTe/ ZnTe, выращенных на GaAs (100) эпитаксией из молекулярных пучков // ФТП. – 2000. – Т.34, вып. 8. – С. 998-1003.

14 Broniatowski A., Blosse A., Srivastava P.C., Bourgoin J.C. Transient capacitance measurements on resistive samples // J. Appl. Phys. - 1983. - Vol.54. - P.2907- 2910.

15 Астрова Е.В., Лебедев А.А., Лебедев А.А. Влияние последовательного сопротивления диода на нестационарные емкостные измерения параметров глубоких уровней // ФТП. – 1985. – Т.19, вып.8. – С. 1382-1385.

16 Антонова И.В., Шаймеев С.С. Температурная зависимость амплитуды пика DLTS в кремнии с глубокими центрами // ФТП. – 1991. – Т.25, вып.5. – С. 847-851.

17 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 // Вестник КазНУ, серия физическая. – 2017. – №1 (60). – С.148-156.

18 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.

19 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 Okt. 1987. – 1988. – P.399-452.

20 Зи С.М. Физика полупроводниковых приборов. В 2-х т. Пер. с англ. – М.: Мир, 1984. – Т.1. – 456 с.

References

1 D.V. Lang, J. Appl. Phys. 45, 3023-3032, (1974)

2 L.S. Berman and A.A. Lebedev, Emkostnaya spectroscopiya glubokikh centrov v poluprovodnikakh, (L: Izd-vo Nauka, 1981) 176 p. (in Russ).

3 H.G. Grimmeiss and C. Ovren, J. Phys. E.: Scientific Instr. 14, 10, 1032–1042, (1981).

4 R.K. Akchurin, D.G. Andrianov and L.S. Berman i dr., Fizika i materialovedenie poluprovodnikov s glubokimi urovnyami, (M: Izd-vo Metallurgiya, 1987), 232 p. (in Russ).

5 C.T. Sah., L. Forbes, L.L. Rosier and A.F. Tasch, Solid-State Electronics. 13, 8, 759–788. (1970).

6 D.V. Lang, Space charge spectroscopy in semiconductors, Thermally stimulated relaxation processes in solids, Ed. by P. Braunlich. (New York: Springer-Verlag, 1979), p.93–133.

7 N.M. Johnson, Optical engineering 5, 698–704, (1986).

8 A.A. Denisov, V.N. Laktiushkin and Yu.G. Sadofev, Relaksacionnaya spectroskopiya glubokikh urovney. Obzory po elektronnoy tekhnike, ser. tekhnologiya, organizaciya proizvodstva I oborudovanie. (M: TCNII Elektronika, 1985, 15, 144), 52 p. (in Russ).

9 J.W. Farmer and J.C. Nugent, Mater. Proc. 4th Neutron Transmutat. Doping Conf., (Gaithersburg, Md, 1–3 June, 1982. New York, London, 1984), p. 225–239.

10 N.I. Kuznetsov, FTP 27, 10, 1674-1679, (1993) (in Russ).

11 K. Schmalz, I.N. Yassievich, H. Rucker, and H.G. Grimmeis, Phys. Rev. B 50, 14287-14301, (1994).

12 O. Chretien, R. Apetz, L. Vescan, A. Souifi, H. Luth, K. Schmalz and J.J. Koulmann, J. Appl. Phys. 78, 5439-5447, (1995).

13 V.I. Kozlovskii, Yu.G. Sadofev and V.G. Litvinov, Razryv zon v strukturakh s odinochnov kvantovov yamoi Zn1-xCdxTe/ ZnTe, vyrashennykh na GaAs (100) epitaksiev iz molekulvarnykh puchkov (T: Izd-vo FTP, 2000, 8), p.998-1003. (in Russ).

14 A. Broniatowski, A. Blosse, P.C. Srivastava and J.C. Bourgoin, Appl. Phys. 54, 2907-2910, (1983).

15 E.V. Astrova and A.A. Lebedev, FTP 8, 1382-1385, (1985). (in Russ).

16 I.V. Antonova and S.S. Shaimeev, FTP 25, 5, 847-851, (1991). (in Russ).

17 K.P. Aimaganbetov, K.S. Zholdybaev, S.R. Zhantuarov, B.S. Rakhimbaev and N.S. Tokmoldin, Recent Contributions to Physics, 1 (60), 148-156, (2017). (in Russ).

18 X. Boddaert, X. Letartle, D. Stevenard and J. Bourgouin, Add. mater. Process and Devices III-V Compound Semicond.: Symp. (Boston, Nov.28-Dec.2, 1988, 1989, Pittsbur.), p.3-8.

19 H. Von Bardeleben, J. Bourgouin, D. Stevenard and M. Lannoo, Proc. 14th int. symp. (Heraclion 28 Sept.-10 Okt. 1987, 1988), p.399-452.

20 S.M. Zi, Fizika poluprovodnikovykh priborov (Moscow: Izd-vo Mir, v 2-kh t. per s angl., 1984), 456 p. (in Russ).

МРНТИ 004.8.004.83

Медетов Б.Ж.*, Албанбай Н., Ниязалиев К.А.

Научно-исследовательский институт экспериментальной и теоретической физики, Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Казахстан, Алматы *e-mail: bm02@mail.ru

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ СТАТИСТИКИ КОЛИЧЕСТВА БЕРСТОВ В КЛАСТЕРЕ АВТОКОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СИСТЕМ

При исследовании кластера автоколебательных систем, состоящего из двух связанных нейронов ФитцХью – Нагумо, определены 4 режима генерации сигналов: «быстрый», «медленный», «bursting», «покой». Установлено, что качественный переход из одного режима в другой происходит не только в зависимости от заданных начальных условий и параметров системы, но так же из-за влияния шумов и флуктуаций. Кроме того найдено, что при определенном диапазоне интенсивности шума для одних и тех же значений параметров, количество берстов, генерируемых в режиме «bursting», является конечным и непостоянным. Для изучения закономерности распределения количества берстов собрана экспериментальная установка, с помощью которой в автоматическом режиме измерена соответствующая статистика. Автоматизация эксперимента выполнена средствами LabVIEW, а обработка данных и подсчет распределения количества берстов осуществлены по определенному алгоритму в среде Matlab. В результате установлено, что распределение количества берстов описывается экспериментов.

Ключевые слова: берст, автоколебательная система, LabVIEW, нейрон, шум.

Medetov B.Zh.*, Albanbay N., Niyazaliyev K.A.

Institute of Experimental and Theoretical Physics, Al-Farabi Kazakh National University, Kazakhstan, Almaty *e-mail: bm02@mail.ru

Experimental determination of the statistics of the number of bursts in a cluster of auto-oscillatory systems

In the study of a cluster of auto-oscillating systems consisting of two coupled FitzHugh-Nagumo neurons, four signal generation modes were defined: "fast", "slow", "bursting", "rest". It is established that the qualitative transition from one regime to another occurs not only in dependence on the given initial conditions and the parameters of the system, but also because of the influence of noise and fluctuations. In addition, it was found that for a certain range of noise intensity for the same parameter values, the number of bursts generated in bursting mode is finite and not constant. To study the regularity of the distribution of the number of bursts, an experimental setup has been assembled, with the help of which the corresponding statistics were measured automatically. The automation of the distribution of the number of LabVIEW, and data processing and calculation of the distribution of the number of bursts were calculated according to a certain algorithm in the Matlab environment. As a result, it is established that the distribution of bursts is described by an exponential dependence.

Key words: burst, auto-oscillating system, LabVIEW, neural, noise.

Медетов Б.Ж.*, Албанбай Н., Ниязалиев Қ.А. Эксперименттік және теориялық физика ғылыми-зерттеу институты, Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Қазақстан, Алматы *e-mail: bm02@mail.ru

Автотербелмелі жүйелер кластеріндегі берсттер санының статистикасын эксперименталды анықтау

Автотербелмелі жүйе ретінде алынған ФитцХью-Нагумо нейронның екі сызықты-теріс байланысынан құрылған автотербелмелі жүйелер кластерінде 4 түрлі сигнал генерациялау режимдері: «жылдам», «баяу», «bursting», «тыныштық» бар екені белгілі. Аталған режимдердің бір-біріне сапалық ауысуы тек параметрлердің мәніне ғана емес, сонымен қатар, шуылдың әсеріне де тәуелді екені анықталды. Осыған байланысты шуыл интенсивтілігінің белгілі бір дипазонында және параметрлердің бекітілген алғашқы мәндерінде «bursting» режимі генерациялайтын берсттер саны шекті және тұрақсыз екені эксперимент жүзінде анықталды. Берсттер санының таралу заңдылығын зерттеу үшін, сәйкесінше статистиканы автоматты түрде өлшеу үшін эксперименталды қондырғы жиналды. Эксперимент автоматтандырылуы LabVIEW көмегімен жасалса, ал мәліметтерді өңдеу және берсттер таралуы белгілі бір алгоритм бойынша Matlab ортасында есептелді. Нәтижесінде берсттердің таралуы экспоненциалды.

Түйін сөздер: берст, автотербелмелі жүйе, LabVIEW, нейрон, шуыл.

Введение

качестве автоколебательной системы В рассмотрена модель нейрона ФитцХью-Нагумо [1-10], а кластер автоколебательных систем образовывается линейно-отрицательной связью между нейронами. В результате теоретических, численных и экспериментальных исследований динамики рассматриваемой системы нейронов, определены 4 режима генерации сигналов: «быстрый», «медленный», «bursting» [11-12], «покой». Численные исследования показывают, что установление различных режимов генерации сигналов рассматриваемым кластером довольно сильно зависит от точности интегрирования уравнений [13-16], описывающих динамику системы. Физическим объяснением такого поведения системы может служить влияние флуктуаций и шумов на автоколебательную систему. Для подтверждения данного предположения в систему дифференциальных уравнений были внесены стохастические члены $\xi_1(t)$ и $\xi_2(t)$, моделирующие гауссовский белый шум [17]. В таком случае, математическую модель нейронов ФитцХью-Нагумо, входящих в состав рассматриваемого кластера, можно представить в следующем виде:

$$\frac{dx_1}{dt} = x_1 - x_1^3/3 - y_1 + \gamma_1 x_2 + \sqrt{2T}\xi_1(t),$$
$$\frac{dy_1}{dt} = \varepsilon_1(x_1 + a_1),$$

$$\begin{aligned} \frac{dx_2}{dt} &= x_2 - x_2^3/3 - y_2 + \gamma_2 x_1 + \sqrt{2T} \xi_2(t), (1.1), \\ \frac{dy_2}{dt} &= \varepsilon_2(x_2 + a_2), \end{aligned}$$

где стохастические члены $\xi_i(t), i = 1, 2$ моделигауссовским руются белым шумом $\langle \xi_i(t_1)\xi_i(t_2)\rangle = \delta_{i,i}\delta(t_1 - t_2)$, и характеризуются параметром Т, означающим интенсивность шума. Решение системы дифференциальных уравнений (1.1) применили метод Хойна. В ходе исследования задавались различные уровни шума. При отсутствии шума решения соответствовали режимам с заданными параметрами, но при увеличении уровня шума система переходит в режим «bursting». Также стоить отметить, что экспериментальные исследования, проведенные на аналоговой электронной схеме, показали, что при заданных параметрах системы из-за шумов и флуктуаций генерируется режим «bursting».

Во всех автоколебательных системах имеется воздействие шумов и флуктуаций. Стоит заметить, что в зависимости от динамики системы влияние шумов и флуктуаций на систему могут быть различны. Теоретические исследования показали, что при различных реализациях шума, при переходе системы из режима «bursting» в другой режим генерируются разное количество берстов (рисунок 1). Также стоит отметить, что аналогичные результаты были получены схемотехническим и реальным физическим экспериментами [18-20]. Поскольку, при определенном диапазоне интенсивности шума для одних и тех же значений параметров, количество берстов, генерируемых в режиме «bursting», является конечным и не постоянным, был проведен эксперимент для определения зависимости распределения количество берстов для разных уровней реализации шума.



Рисунок 1 – Количество берстов для каждой реализаци шума

Эксперимент

Как известно, для представления зависимости распределения величин требуются сбор, измерение и анализ массовых статистических данных. Поскольку для сбора данных наше исследование требовало реального физического эксперимента, автоматизация эксперимента проводилась при помощи LabVIEW, а анализ большого объема данных проводился в пакете прикладных программ Matlab.

Описание экспериментальной установки. На рисунке 2 приведена блок-схема работы автоматизирующей программы, которая описана на специальном графическом языке данной системы. Экспериментальные измерения производятся в цикле, количество итераций которого задается с помощью элемента «Cycle count» (см. рис.2). Далее в цикле исполняются команды, вписанные в прямоугольную область. У этой области на левом верхнем углу имеется обозначение в виде буквы «N». Из рисунка 2 видно, что в рамку, означающей тело цикла, вписана еще одна прямоугольная область, которая в свою очередь состоит из двух отсеков. В первом отсеке имеются всего два элемента: 1) NI ELVISmx Digital Writer и 2) Таймер. Первый элемент со стороны программы отправляет в экспериментальную установку логический ноль, что соответствует низкому значению напряжения. Это сообщение переводит аналоговую схему в режим «задания начальных условий». Время нахождения аналоговой схемы в этом режиме определяется значением таймера, в данном случае оно равно 1 сек (единица измерения таймера - миллисекунды). В режиме задания начальных условий установка не выполняет интегрирования, а происходит только подзарядка конденсатора аналогового интегратора до нужного уровня напряжения, соответствующего начальному условию.

На следующем этапе в теле цикла выполняются операции, указанные во втором отсеке, в котором расположены три элемента: 1) NI ELVISmx Digital Writer2; 2) DAQ Assistant и 3) Write to Measurement File. Первый элемент сообщает экспериментальной установке логическую единицу, в результате чего аналоговая схема переводится в режим интегрирования. И
тут же одновоременно с этим начинет свою работу DAQ Assistant, который собирает в буфере компьютера (в оперативной памяти) значения сигнала, получаемого из экспери-

ментальной установки. Наконец, третий элемент, который называется «Write to Measurement File», выполняет запись массива значений сигнала в файл.



Рисунок 2 – Блок-схема программы, разработанной в среде LabVIEW, предназначенная для автоматизации эксперимента

На завершающей стадии, как видим из рисунка 2, расположен один единственный элемент - NI ELVISmx Digital Writer3. Данный элемент посылает логический ноль на специальный вход платформы «NI ELVIS II+», сигнализирует необходимости который 0 остановки всех процессов. Т.е. таким образом автоматически «завершаем» работу установки.

Условие записи сигналов следующее: 1. Частота дискретизации – 500 Гц. Такая частота установлена по двум соображениям – уменьшить объем данных, но при этом обеспечить выполнение условий теоремы Котельникова-Найквиста (теоремы о дискретизации); 2. Длительность записи сигналов от одного ceaнса 10 сек; 3. Количество повторений эксперимента – 3000. Таким образом, на выходе получаем 3000 файлов, содержащие экспериментальные значения, соответствующие каждому конкретному экспериментальному измерению. На рисунке 3, показан пример временной реализации, где можно увидеть берсты, получаемые из эксперимента.



Рисунок 3 – Пример берстов, полученных из эксперимента

Алгоритм подсчета количества берстов

Подсчет количества берстов осуществляется по следующему алгоритму:

1. Сначала вручную определяем примерную длительность одного берста. В наших экспериментах она приблизительно равна 60 мс. (На рисунке 4 показан фрагмент сигнала, соответствующий только одному берсту).

2. Весь временной ряд делим на одинаковые фрагменты с длительностью равной 60 мс. И следующие этапы 3 и 4 выполняем в цикле, количество итераций которого соответствует количеству полученных фрагментов.

3. Для каждого фрагмента сигнала вычисляем спектральную мощность через Фурье преобразования. При этом характерный спектр фрагментов, соответствующих берсту, выглядит так, как показано на рисунке 5. А характерный спектр фрагментов, соответствующих промежуточным между берстами сегментам, выглядит как на рисунке 6. Как видим из этих рисунков, у берстов основная энергия сосредоточена на частотах в окрестности 150 Гц. А для неберстовых фрагментов основная доля энергии приходится на очень низкое значение частоты.

4. Анализируя распределение энергии фрагмента сигнала по частотам, принимается решение о соответствии данного фрагмента либо к берсту, либо к межберстовому сегменту. Если фрагмент распознан как берст, то счетчик берстов увеличиваем. В противном случае увеличиваем счетчик неберстов. Цикл может быть прерван, если счетчик неберстов окажется больше 10, что сигнализирует о том, что генерация берство закончена.



Рисунок 4 – Фрагмент сигнала, соответствующий одному берсту



Рисунок 5 – Спектр мощности, соответствующий берсту



Рисунок 6 – Спектр мощности соответствующий неберстам



Рисунок 7 – Распределение количества берстов до затухания

Заключение

В результате данных исследований определено, что качественный переход между режимами происходит из-за шумов и флуктуаций. Так же было замечено, что каждая реализация шума по разному влият на скорость перехода в другой режим. Данная особенность проявляется разным количеством берстов, распределение которых описывается экспоненциальной зависимостью (рисунок 7).

Благодарности

Авторы статьи выражают искреннюю благодарность за финансовую поддержку из средств гранта №3829/ГФ4 Министерства образования и науки Республики Казахстан.

Литература

1 Cronin J. Mathematical aspects of Hodgkin-Huxley neural theory. – Cambridge University Press, 1987. – 261 p.

2 Hodgkin A.L., Huxley A.F. A quantitative description of membrane current and its application to conduction and excitation in nerve // J. Physiol. -1952. – №117. -P.500-544.

3 FitzHygh R. Impulses and physiological states in theoretical models of nerve membrane // Biophys. J. $-1961. - N_{2}1. - P.445-466.$

4 Pospischil M. et al. Minimal Hodgkin-Huxley type models for different classes of cortical and thalamic neurons. // Biological cybernetics. – 2008. – Vol. 99, № 4-5. – P.427–441.

5 Rabinovich M. et al. Dynamical principles in neuroscience // Reviews of Modern Physics. - 2006. - Vol. 78, № 4. - P.1213-1265.

6 Binczak S. et al. Experimental study of electrical FitzHugh-Nagumo neurons with modified excitability // Neural Networks. Elsevier. – 2006. – Vol. 19, № 5. – P.684–693.

7 Nagumo J., Arimoto S., Yoshizawa S. An active pulse transmission line simulating nerve axon //Proc. IRE. – 1962. – №50. – P.2061-2070.

8 Binczak S., Kazantsev V.B., Nekorkin V.I., Bilbault J.M. Experimental study of bifurcation in modified Fitzhugh-Nagumo cell // Electron. Lett. – 2003. – V.39. – P. 961-962.

9 Nagumo J., Arimoto S., Yoshizawa S. An active pulse transmission line simulating nerve axon // Proc. IRE. – 1962. – №50. – P.2061-2070.

10 Максимов А.Г., Некоркин В.И. Гетероклинические траектории и фронты сложной формы модели ФитцХью-Нагумо // Математическое моделирование. – 1990. – Т.2, №2. – С.129-142.

11 Nekorkin V.I., Kazantsev V.B., Velarde M.G. Spike-burst and other oscillations in a system composed of two coupled, drastically different elements // The European Physical Journal B – 2000. – Vol. 16, $N_{\rm D}$ 1. – P. 147–155.

12 Plant R.E. Bifurcation and resonance in a model for bursting nerve cells // Journal of mathematical biology. -1981. - Vol. 11, No 1. - P. 15-32.

13 Жанабаев З.Ж., Закс М., Медетов Б.Ж. Генерация сигналов кластером связанных двух автоколебательных систем на границе потери устойчивости равновесия. Теория // Журнал проблем эволюции открытых систем. – Алматы, 2012. – Т.1, вып.14. – С.31-35.

14 Наурзбаева А.Ж., Медетов Б.Ж., Ыскак А.Е. Численное исследование двухчастотного режима генерации сигналов кластером автоколебательных систем //Известия НАН РК, серия физическая. – Алматы, 2013. – №2(288). – С. 134-137.

15 Medetov B., Weiss G., Zhanabaev Zh., Zaks M. Numerically induced bursting in a set of coupled neuronal oscillators // Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation. – 2015. – Vol 20, Issue 3. – P.1090-1098.

16 Патент РК №7-9-2929 Трехрежимный радиотехнический генератор сигналов на основе двух линейно – отрицательно связанных нейронов ФитцХью-Нагумо. Жанабаев З.Ж., Медетов Б.Ж., Албанбай Н., Кожагулов Е.Т. Опубл.30.10.2014.

17 Койшигарин А.С., Медетов Б.Ж., Албанбай Н. Численное исследование влияния шума и флуктуаций на режимы генерации кластером автоколебательных систем. Теория. // Журнал ПЭОС. – 2015. – Т.1, – вып. 17.

18 Медетов Б.Ж., Наурзбаева А.Ж., Албанбай Н., Манапбаева А.Б. Экспериментальное измерение сигналов кластера связанных автоколебательных систем // Журнал ПЭОС. – 2013. – Т.1, вып. 15. – С. 17-23.

19 Наурзбаева А.Ж., Медетов Б.Ж., Есерханулы Е. Схемотехническое моделирование «двухчастотной» бифуркации Хопфа // Известия НАН РК, серия физическая. – 2013. – №2(288). – С. 142-145.

20 Медетов Б.Ж., Албанбай Н., Койшигарин А.С., Ниязалиев К.А. ФитцХью-Нагумо нейрондарынан құралған кластердің шуыл әсерінен «тыныштық» күйден «bursting» режиміне көшуін эксперименталдық зерттеу // Сборник тезисов Междун. конф. молодых ученых «Фараби әлемі», 13-16 апреля, 2015, Алматы. – 2015. – С.421.

References

1 J. Cronin, Mathematical aspects of Hodgkin-Huxley neural theory (Cambridge University Press, 1987). doi.org/10.1017/CBO9780511983955.

2 A.L. Hodgkin and A.F. Huxley, J. Physiol 117, 500-544, (1952).

- 3 R. FitzHygh, Biophys 1, 445-466, (1961).
- 4 M. Pospischil at al, Biological cybernetics 99, № 4-5, 427–441, (2008).
- 5 M. Rabinovich at al. Reviews of Modern Physics 78, 4, 1213–1265, (2006).
- 6 S. Binczak at al, Neural Networks 19, 5, 684–693, (2006).
- 7 J. Nagumo, S. Arimoto, and S. Yoshizawa, Proc. IRE 50, 2061-2070, (1962).
- 8 S. Binczak, V.B. Kazantsev, V.I. Nekorkin, and J.M. Bilbault, Electron. Lett. **39**, 961-962, (2003).
- 9 J. Nagumo, S. Arimoto and S. Yoshizawa, Proc. IRE 50, 2061-2070, (1962).
- 10 A.G. Maksimov and V.I. Nekorkin, Matematicheskoye modelirovaniye 2, 129-142, (1990). (in Russ).
- 11 V.I. Nekorkin, V.B. Kazantsev, and M.G. Velarde, The European Physical Journal B 16, 1, 147–155, (2000).
- 12 R.E. Plant, Journal of mathematical biology 11, 15–32, (1981).

13 Z.Zh. Zhanabayev, M. Zaks, and B.ZH. Medetov, Zhurnal problem evolyutsii otkrytykh sistem 1, 31-35, (2012). (in Russ).

14 A.Zh. Naurzbayeva, B.ZH. Medetov, and A.Ye. Yskak, Izvestiya NAN RK, seriya fizicheskaya **2**(288), 134-137, (2013). (in Russ).

15 B. Medetov, G. Weiss, Zh. Zhanabaev and M. Zaks., Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation **20**, 3, 1090-1098, (2015). <u>doi.org/10.1016/j.cnsns.2014.07.004</u>

16 Patent RK №7-9-2929ю Trekhrezhimnyy radiotekhnicheskiy generator signalov na osnove dvukh lineyno – otritsatel'no svyazannykh neyronov FittsKH'yu-Nagumo, Z.Zh. Zhanabayev, B.Zh. Medetov, N. Albanbay i Ye.T. Kozhagulov. Opubl.30.10.2014. (in Russ).

17 A.S. Koyshigarin, B.ZH. Medetov i N. Albanbay, Zhurnal problem evolyutsii otkrytykh sistem 17, 1, (2015) (in Russ).

- 18 B.Zh. Medetov, A.Zh. Naurzbayeva, N. Albanbay, and A.B. Manapbayeva, Zhurnal problem evolyutsii otkrytykh sistem 1, 15, 17-23, (2013). (in Russ).
- 19 A.Zh. Naurzbaeva, B.Zh. Medetov, and E. Yeserhanuly, Izvestiya NAS RK, series physical 2, 288, 142-145, (2013). (in Russ).
- 20 B.ZH. Medetov, N. Albanbay, A.S. Koyshigarin, and K.A. Niyazaliyev, *Book abstract of the Intern. Conf.* «Farabi alemi», (13-16 April, 2015, Almaty), 421. (in Russ).

МАЗМҰНЫ – СОДЕРЖАНИЕ

1-бөлім	Раздел 1
Жылу физикасы және	Теплофизика и
теориялық жылу техникасы	теоретическая теплотехника
Аскарова А.С., Болегенова С.А., Болегенова С.А., Максимов В	Ю., Бекетаева М.Т.
Исследование формирования азотистых веществ при горении	угольного топлива4
Дробышев А.С., Соколов Д.Ю., Шинбаева А.К., Нурмукан А.Е.	, Дуйсебаев Т.С.
Плотность тонких пленок криовакуумных конденсатов метана	а10
Жаврин Ю.И., Молдабекова М.С., Асембаева М.К., Федоренко	О.В., Мукамеденкызы В.
Температурные зависимости эффективных коэффициентов ди	ффузии для двух многокомпонентных газовых систем,
содержащих воздух, водород и некоторые углеводороды	17
2-бөлім	Раздел 2
Плазма физикасы	Физика плазмы
Шаленов Е.О., Джумагулова К.Н., Рамазанов Т.С., Джумагуло Исследование процесса возбуждения внутренних состояний а	ов М.Н. тома водорода26
Батрышев Д.Г., Ерланулы Е., Рамазанов Т.С., Габдуллин М.Т.,	Абдыкадыров Б.К., Амирбекова Г.С., Дайнеко Р.А.
Исследование структурных и электронных свойств графана и	з первых принципов
Еримбетова Л.Т. Метод интегральных уравнений для пылевых частиц конечны	х размеров
3-бөлім	Раздел 3
Теориялық физика.	Теоретическая физика.
Ядро және элементар бөлшектер	Физика ядра и элементарных
физикасы	частиц
Арынгазин А., Джунушалиев В., Фоломеев В. Духовое скалярное поле в нейтронной звезде	
Демченко Б.И., Комаров А.А., Серебрянский А.В., Усольцева Л.	.А., Акниязов Ч.Б.
Особенности движения геостационарных спутников	
Абишев М.Е., Нуршаева Ф.С. Исследование короткоживущих радионуклидов для диагности в КазНИИ онкологии и радиологии	ки онкологических заболеваний на основе практики
<i>Тасмұрат А.З., Бекбаев А.К., Азнабаев Д.Т.</i> <i>H</i> ⁺ ₂ , <i>HD</i> ⁺ , <i>D</i> ⁺ ₂ сутегі молекулалық иондар	
Жумадилов К.Ш., Иванников А.И., Степаненко В.Ф., Тойода I	<i>Ш., Хоши М.</i>
Дозиметрическое исследование населения села, подвергшегос	ся облучению после испытания 29 августа 1949 года
на Семипалатинском полигоне	
Блынский П.А., Панова Е.Н., Жаксыбекова К.А., Кенжина И.Е.	7.
Восстановление подземных вод рудного горизонта отработани	ных урановых месторождений
в процессе рекультивации	
Жумадилов К.Ш., Иванников А.И., Степаненко В.Ф., Скворцов	в В.Г., Тойода Ш., Хоши М.
Исследование населения города Степногорска, расположенно	го в непосредственной близости
от ураноперерабатывающего завода	

4-бөлім Раздел 4

Конденсирленген күй физикасы және Физика конденсированного состояния и проблемы материаловедения

Аймағанбетов К.П., Тоқмолдин Н.С. Релаксационды спектроскопия әдісімен кремнилі диодтың терең деңгейлі параметрлерін зерттеу	100
Медетов Б.Ж., Албанбай Н., Ниязалиев К.А. Экспериментальное определение статистики количества берстов в кластере автоколебательных систем	106

CONTENTS

Section 1 Thermal Physics and Theoretical Thermal Engineering

Askarova A.S., Bolegenova S.A., Bolegenova S.A., Maximov V.Yu., Beketayeva M.T. Study of nitrogenous substances formation during combustion of coal	4
Drobyshev A.S., Sokolov D.Yu., Shinbayeva A.K., Nurmukan. A.Y., Duisebayev T.S. Density of thin films of cryovacuum condensates of methane	10
<i>Zhavrin Yu.I., Moldabekova M.C., Asembaeva M.K., Fedorenko O.V., Mukamedenkyzy V.</i> Temperature dependences of the effective diffusion coefficients for two multicomponent gaseous systems containing air, hydrogen and some hydrocarbons	17

Section 2 Plasma Physics

Shalenov E.O., Dzhumagulova K.N., Ramazanov T.S., Dzhumagulov M.N Investigation of the excitation of the internal states of hydrogen atom	26
Batryshev D.G., Yerlanuly Ye., Ramazanov T.S., Gabdullin M.T., Abdykadyrov B.K., Amirbekova G.S., Daineko R.A. First principle calculation of the structural and electronic properties of graphane	34
Yerimbetova L.T. Method of integral equations for dust particles of finite size	40

Section 3 Theoretical Physics. Nuclear and Elementary Particle Physics

Aringazin A., Dzhunushaliev V., Folomeev V. Ghost scalar field in neutron star	52
Demchenko B.I., Komarov A.A., Serebryanskiy A.V., Usoltseva L.A., Akniyazov Ch.B. Peculiarities of movement of geostationary satellites	59
Abishev M.E., Nurshayeva F.S. The investigation of short-lived radionuclides for diagnosis of oncological diseases on the basis of practice in KazNRI of oncology and radiology	67
Tasmurat A.Z., Bekbaev A.K., Aznabayev D.T. H_2^+, HD^+, D_2^+ hydrogen molecular ions	73
Zhumadilov K.Sh., Ivannikov A.I., Stepanenko V.F., Toyoda S., Hoshi M. Dosimetry study of exposed population of villages, after the test in August 29, 1949 at the Semipalatinsk test site	80
<i>Blynskiy P.A., Panova E.N., Zhaksybekova K.A., Kenzhina I.E.</i> Recovery of the groundwater of spent uranium deposits ore horizon during the remediation process	87
Zhumadilov K.Sh., Ivannikov A.I., Stepanenko V.F., Skvortsov V.G., Toyoda S., Hoshi M.4 Investigation of Stepnogorsk city population residing near uranium processing plant	94

Section 4 Condensed Matter Physics and Materials Science Problems

Aimaganbetov K.P., Tokmoldin N.S. Study of deep level parameters in a silicon diode using capacity-based deep level transient spectroscopy	. 100
<i>Medetov B.Zh., Albanbay N., Niyazaliyev K.A.</i> Experimental determination of the statistics of the number of bursts in a cluster of auto-oscillatory systems	. 106

УСПЕЙТЕ ПОДПИСАТЬСЯ НА СВОЙ ЖУРНАЛ



Каждому подписчику ПУБЛИКАЦИЯ СТАТЬИ БЕСПЛАТНО!!!

• Акция действительна при наличии квитанции об оплате годовой подписки.

• Статья должна соответствовать требованиям размещения публикации в журнале.

• Статья печатается в той серии журнала, на которую подписался автор.

• Все нюансы, связанные с публикацией статьи, обсуждаются с ответственным секретарем журнала.

Издательский дом «Қазақ университеті» г. Алматы, пр. аль-Фараби, 71 8 (727) 377 34 11, 221 14 65 АО «КАЗПОЧТА» г. Алматы, ул. Богенбай батыра, 134 8 (727 2) 61 61 12 ТОО «Евразия пресс» г. Алматы, ул. Жибек Жолы, 6/2 8 (727) 382 25 11

ТОО «Эврика-пресс» г. Алматы, ул. Кожамкулова, 124, оф. 47 8 (727) 233 76 19, 233 78 50