

ISSN 1563-0315; eISSN 2663-2276
Индекс 75877; 25877

ӘЛ-ФАРАБИ атындағы ҚАЗАҚ ҮЛТТЫҚ УНИВЕРСИТЕТИ

ХАБАРШЫ

Физика сериясы

КАЗАХСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ имени АЛЬ-ФАРАБИ

ВЕСТНИК

Серия физическая

AL-FARABI KAZAKH NATIONAL UNIVERSITY

RECENT CONTRIBUTIONS TO PHYSICS

№1 (68)

Алматы
«Қазақ университеті»
2019



ХАБАРШЫ

ФИЗИКА СЕРИЯСЫ № 1 (68) наурыз



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

Куәлік №956-Ж.

Журнал жылына 4 рет жарыққа шығады

ЖАУАПТЫ ХАТШЫ

Иманбаева А.К., ф.-м.ғ.к. (Қазақстан)

Телефон: +7(727) 377-33-46

E-mail: akmaral@physics.kz

РЕДАКЦИЯ АЛҚАСЫ:

Давлетов А.Е., ф.-м.ғ.д., профессор – ғылыми редактор (Қазақстан)

Лаврищев О.А., ф.-м.ғ.к. – ғылыми редактордың орынбасары (Қазақстан)

Әбішев М.Е., ф.-м.ғ.д., профессор (Қазақстан)

Аскарова Э.С., ф.-м.ғ.д., профессор (Қазақстан)

Бұртебаев Н., ф.-м.ғ.д., профессор (Қазақстан)

Дробышев А.С., ф.-м.ғ.д., профессор (Қазақстан)

Жаңабаев З.Ж., ф.-м.ғ.д., профессор (Қазақстан)

Косов В.Н., ф.-м.ғ.д., профессор (Қазақстан)

Буфенди Лайфа, профессор (Франция)

Иващук В.Д., ф.-м.ғ.д., профессор (Ресей)

Ишицука Эцуо, доктор (Жапония)

Лунарска Элина, профессор (Польша)

Сафарик П., доктор (Чехия)

Тимошенко В.Ю., ф.-м.ғ.д., профессор (Ресей)

Кеведо Эрнандо, профессор (Мексика)

ТЕХНИКАЛЫҚ ХАТШЫ

Дьячков В.В., ф.-м.ғ.к. (Қазақстан)

Физика сериясы – физика саласындағы іргелі және қолданбалы зерттеулер бойынша бірегей ғылыми және шолу мақалаларды жариялайтын ғылыми басылым.



Ғылыми басылымдар болімінің басшысы

Гульмира Шаккозова

Телефон: +7 747 125 6790

E-mail: Gulmira.Shakkozova@kaznu.kz

Редакторлары:

Гульмира Бекбердиева

Агила Хасанұзы

Компьютерде беттеген

Айғүл Алдашева

ИБ № 12726

Пішімі 60x84 $\frac{1}{g}$. Колемі 10,8 б.т. Оффсетті қағаз.

Сандық басылыш. Тапсырыс № 1897. Багасы көлісімді.

Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университетінің

«Қазақ университеті» баспа үйі.

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

«Қазақ университеті» баспа үйінді баспаханасында басылды.

© Әл-Фараби атындағы ҚазҰУ, 2019

1-бөлім

**ТЕОРИЯЛЫҚ ФИЗИКА.
ЯДРО ЖӘНЕ ЭЛЕМЕНТАР БӨЛШЕКТЕР
ФИЗИКАСЫ. АСТРОФИЗИКА**

Section 1

**THEORETICAL PHYSICS.
NUCLEAR AND ELEMENTARY PARTICLE
PHYSICS. ASTROPHYSICS**

Раздел 1

**ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА.
ФИЗИКА ЯДРА И ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ.
АСТРОФИЗИКА**

МРНТИ 29.05.41

Джунушалиев В.Д., Нуртаева Г.К.*, Серикболова А.А.

Казахский национальный университет им. аль-Фараби, НИИЭТФ,
Казахстан, г. Алматы, *e-mail: nurtayevagalyia2017@gmail.com

ПЛОСКО-СИММЕТРИЧНЫЕ РЕШЕНИЯ В $-\alpha R^n$ ГРАВИТАЦИИ

Одним из наиболее интересных и перспективных направлений в современной теоретической физике является изучение модифицированных теорий гравитации. Целью этого направления является описание гравитации в рамках модифицированной теории так, чтобы, не входя в противоречие с имеющимися экспериментальными данными, предложить лучшее описание широкого круга явлений в космологии, в том числе для лучшего понимания природы темных материй и энергии.

В этой работе исследуются астрофизические объекты: 4-мерные доменные стенки и 6-мерные thick branes в $F(R) = -\alpha R^n$ модифицированной теории гравитации. Получены регулярные асимптотически анти-де Sitter'овские решения в некотором диапазоне значений параметров n и δ . Главная особенность этих моделей заключается в существовании особой точки в фазовом пространстве, представляющей собой центр браны.

Ключевые слова: модифицированные теории гравитации, доменная стенка, thick brane.

Dzhunushaliev V., Nurtayeva G.K.*, Serikbolova A.A.

Al-Farabi Kazakh National University, IETP, Kazakhstan, Almaty,
*e-mail: nurtayevagalyia2017@gmail.com

Flat-symmetric solutions in $-\alpha R^n$ gravity

One of the most interesting and perspective directions in modern theoretical physics is studying of the modified gravity theories. The purpose of this direction is the description of gravitation within the modified theory so that without being in a conflict with the available experimental data to offer the best description of a wide range of the phenomena in cosmology, including, for the best understanding of the nature of dark matters and energy.

In this work astrophysical objects are investigated: 4-dimensional domain walls and 6-dimensional thick branes in $F(R) = -\alpha R^n$ the modified theory of gravity. Regular asymptotically anti-de Sitter solutions in some range of value of the parameter n and δ were obtained. The main feature of these models consists in existence of a fixed point in phase space representing the center of a brane.

Key words: modified theories of gravity, domain wall, thick brane.

Джунушалиев В.Д., Нуртаева Г.К.*, Серікболова А.А.

әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, ӘТФГЗИ, Қазақстан, Алматы қ.
*e-mail: nurtayevagalyia2017@gmail.com

$-\alpha R^n$ гравитациядағы жалпақ-симметриялық шешімдер

Қазіргі заманауи теориялық физиканың кең аумақты бағыттарының бірі – модификацияланған гравитация теориясын зерттеу. Бұл бағыттың маңызы – гравитацияны модификацияланған теория шенберінде, қолданыстағы тәжірибелік деректерге қайшы келмейтіндей сипаттау және космологиядағы кең аукындық құбылыстардың сипаттамасын ұсыну, соның ішінде қаранғы заттар мен энергияның табиғатын жақсы түсіну үшін.

Осы мақалада астрофизикалық объектілер зерттелді: 4-өлшемді домен қабырғалары және $F(R) = -\alpha R^n$ -дегі 6-өлшемді қалың браналар гравитацияның модификацияланған теориясы. Тұрақты асимптоталық анти-де Ситтер шешімдерін пәннен 6 параметрлерінің белгілі бір мәндер ауқымында алынады. Бұл модельдердің басты ерекшелігі фазааралық, кеңістіктегі жалғыз нүктенің болуы, бұл брананың орталығы болып табылады.

Түйін сөздер: модификацияланған гравитация теориясы, домендік қабырға, thick brane.

Введение

В 1998 году было обнаружено одно из удивительных открытий того времени – ускоренное расширение Вселенной. Первоначально, ускоренное расширение Вселенной было обнаружено для наблюдения сверхновых типа Ia. Но после тщательного анализа полученных результатов был сделан вывод о том, что наша Вселенная расширяется с ускорением. Это наблюдение противоречило выводам теории Эйнштейна, согласно которым Вселенная должна расширяться с замедлением.

Вплоть до настоящего момента, мы не понимаем природы ускоренного расширения Вселенной. Существуют различные гипотезы, претендующие на описание такого расширения Вселенной. Широко распространено мнение, что это явление можно объяснить существованием «темной энергии». Ожидается, что темная энергия это – либо свойство вакуума, либо какое-то новое физическое поле, либо для объяснения этого явления необходима новая теория гравитации. В случае, если темная энергия является веществом, то она должна иметь экзотические свойства: отрицательное давление и очень необычную связь между давлением и плотностью этого вещества.

Современная космология пока не в состоянии ответить на такие фундаментальные вопросы как, что такое инфляция и что такое темная энергия? Имеется хорошо аргументированная точка зрения, что для описания этих двух эпох ускоренного расширения Вселенной можно применять те же принципы и модели.

В настоящее время существует еще один подход к объяснению ускоренного расширения Вселенной, в котором не используется общая теория относительности. Одним из широко распространенных методов исследования современного ускоренного расширения являются использование модифицированных теорий гравитации. Интерес к этим теориям гравитации связан с возможностью объяснения ускоренного расширения Вселенной без введения гипотетической темной энергии, физические свойства

которой совершенно неясны. Помимо применения модифицированной теории гравитации для объяснения современного ускоренного расширения Вселенной, эти теории могут быть применены для получения в рамках этих теорий многих астрофизических объектов, предсказанных общей теорией относительности: доменные стенки, космические струны, червоточины, бозонные звезды и т.д.

Особенностью этих теорий является то, что плотность лагранжиана в них не является скалярной кривизной R , как это было в ОТО. Лагранжиан в этом случае является некоторой функцией скалярной кривизны: $\mathcal{F}(R)$. Одним из удивительных особенностей в этих теориях является то, что они могут объяснить не только инфляцию на ранней стадии Вселенной, но и современное ускоренное расширение Вселенной, что также может быть полезно для решения проблем физики высоких энергий.

Данная работа организована следующим образом. В начале статьи дается краткое введение в $\mathcal{F}(R)$ гравитацию. В следующем разделе, мы рассматриваем детально образование доменных стенок на ранней стадии Вселенной. Главная часть работы посвящена нахождению 4, 6-мерных плоско-симметричных решений в $-\alpha R^n$ гравитации. В последнем разделе на основании полученных результатов дается заключение.

$\mathcal{F}(R)$ модифицированные теории гравитации

Имеется огромное число популярных модифицированных теорий гравитации: $\mathcal{F}(R)$ -теория Гаусса-Бонне, нелокальная гравитация, $\mathcal{F}(R)$ -гравитация Хорава-Лифшица, перенормируемая ковариантная гравитация. Простейшим примером модифицированной теории являются $\mathcal{F}(R)$ -теории [3]. Можно заметить, что список публикаций по теме $\mathcal{F}(R)$ -гравитации огромен. Различные аспекты $\mathcal{F}(R)$ -гравитации обсуждаются в работах [4] и [5]. $\mathcal{F}(R)$ -гравитация была впервые предложена в 1970 году Хансом Адольфом Бухдалем [6]. Далее, стала активным

инструментом исследования Старобинского [7-11], который применял ее для объяснения инфляции в ранней Вселенной. Напомним, что общая теория относительности является теорией, описывающей гравитацию с помощью метрики, которая в четырех измерениях имеет полевые уравнения с производными не более второго порядка [12]. В этой работе мы рассмотрим модифицированные теории гравитации, полевые уравнения которых имеют производные четвертого порядка.

$\mathcal{F}(R)$ гравитация определяется заменой R члена в действии Эйнштейна-Гильберта функцией $\mathcal{F}(R)$, где R скаляр Риччи и $\mathcal{F}(R)$ произвольная функция от R . Таким образом, для модифицированной теории гравитации действие имеет вид:

$$\mathcal{S} = \frac{1}{16\pi G} \int d^4x \sqrt{-g} [\mathcal{F}(R) + \mathcal{L}_m], \quad (1)$$

где g – обозначает определитель метрики $g_{\mu\nu}$ и \mathcal{L}_m – Лагранжиан материи.

Очевидно, что действие (1) является одним из наиболее простых обобщений действия Эйнштейна-Гильберта. Уравнения поля, полученные из этого действия, автоматически, как правило, ковариантны и лоренц-инвариантны по тем же причинам, что и уравнения Эйнштейна.

Уравнения движения модифицированной гравитации, полученные вариационным принципом из действия (1) имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} g_{\mu\nu} \mathcal{F}(R) - R_{\mu\nu} \mathcal{F}'(R) - g_{\mu\nu} \mathcal{F}'(R) + \\ + \nabla_\mu \nabla_\nu \mathcal{F}'(R) = -\frac{k^2}{2} T_{\mu\nu}, \end{aligned} \quad (2)$$

где

$$\mathcal{F}'(R) = \frac{d\mathcal{F}(R)}{\partial R} \quad (3)$$

и $T_{\mu\nu}$ – тензор энергии-импульса материи.

Доменные стенки и браны в гравитации

В данной работе мы будем исследовать простейшие астрофизические объекты в модифицированной теории гравитации: доменные стенки и браны в 6-мерном пространстве-времени. Доменные стенки впервые были предсказаны в теории гравитации Эйнштейна. В этой теории они были определены как топологические дефекты, возникающие, когда вакуум имеет разные компоненты.

Брана – это по сути струна, только, в отличие от струны, брана может иметь любую размерность. Струна – это одномерная брана. Точечная частица – нуль-мерная брана. Мембрана, представляющая собой двумерную поверхность, является двумерной браной, или 2-браной. Существуют также 3-браны, 4-браны, два вида 5-бран, 6-браны, 7-браны, 8-браны и 9-браны. Такое разнообразие бран наводило на мысль, что теория не может быть сформулирована в терминах одних только струн. Окончательную революционную ситуацию сформировала одиннадцатимерная супергравитация – теория, построенная на основе всего лишь двух идей: суперсимметрии и общей теории относительности.

На этапе создания Вселенной доменные структуры могли быть сформированы механизмом Кибла [13], в результате чего различные области горячей Вселенной охлаждались до разных изолированных минимумов потенциала. Доменные стенки также могут быть сформированы как границы (истинных) вакуумных пузырьков, создаваемых при квантовом распаде ложного вакуума. Кроме того, Вселенная может родиться от квантового процесса туннелирования из ничего в разные доменные стены между ними [30,31].

В космологии предполагается, что при наступлении инфляции могут возникать топологические дефекты. Однако, исследования показали, что такие дефекты до сих пор не обнаружены. Если в нашей вселенной есть некоторые дефекты, то их плотность должна быть очень малой. Топологические дефекты также могут быть источником темной энергии и крупномасштабной структурой Вселенной. Поэтому исследования топологических дефектов полезны для понимания истории нашей вселенной.

Можно показать, что при наличии некоторого дискретного множества вакуумов между ними создаются доменные стены. Это означает, что доменные стенки возникают, когда спонтанно нарушается дискретная группа симметрии.

Примером негравитирующей доменной стенки является теория реального скалярного поля с самодействием

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \partial_\mu \phi \partial^\mu \phi - \frac{\lambda}{4} (\phi^2 - \vartheta^2)^2. \quad (4)$$

При наличии доменной стенки мы имеем нарушение симметрии: $\phi \rightarrow -\phi$. Вследствие чего имеются 2 вакуума: $\phi = \pm\vartheta$, и между ними образовываются доменные стенки. Скалярное поле доменной стенки ϕ в плоском пространстве удовлетворяет уравнению:

$$\frac{d^2\phi}{dz^2} - \lambda(\phi^2 - \vartheta^2)\phi = 0, \quad (5)$$

с граничными условиями:

$$\phi(r = \pm\infty) = \pm\vartheta, \quad (6)$$

что приводит к следующему решению:

$$\phi(z) = \vartheta \operatorname{th} \frac{z}{\Delta}, \quad (7)$$

где $\Delta^2 = \frac{2}{\lambda\vartheta^2}$.

Таким образом, когда происходит спонтанное нарушение симметрии в виде фазового перехода, возникают топологические дефекты. Топологические дефекты зависят от вида нарушения симметрии. В случае доменных стенок нарушаются дискретная симметрия Z_2 , вследствии чего и возникает двумерный плоский дефект.

определяет источник эффективной геометрической материи. Заметим, что уравнения движения в $\mathcal{F}(R)$ -гравитации, записанные в виде (9) имеют структуру, которая совпадает с уравнениями Эйнштейна, в которых источником гравитационного поля является эффективный тензор энергии-импульса (10).

Как было сказано во введении, мы исследуем следующую форму $\mathcal{F}(R)$ гравитации:

$$\mathcal{F}(R) = -\alpha R^n, \quad (11)$$

где $\alpha > 0$ и n некоторые константы. Выбирая $\mathcal{F}(R) \sim R^n$, можно показать, что такие модели находятся в хорошем согласии с наблюдатель-

4, 6 -мерные плоские решения в $-\alpha R^n$ гравитации

В этом параграфе мы рассмотрим плоские решения в модифицированной теории гравитации $-\alpha R^n$ в 4 и 6-мерных пространствах времени, аналогично тому как это было сделано в [1, 2], в которой thick brane рассматривалась в 5-мерном пространстве-времени.

Доменная стенка

Прежде всего, гравитационное действие имеет следующий вид:

$$S = \int d^4x \sqrt{-g} \left[-\frac{R}{2} + \mathcal{F}(R) \right]. \quad (8)$$

Мы исходим из того, что $8\pi G = c = 1$. После вариации гравитационного действия (8) относительно 4-мерного метрического тензора g_{AB} мы получаем уравнения движения:

$$R_\alpha^\beta - \frac{1}{2}\delta_\alpha^\beta R = \hat{T}_\alpha^\beta, \quad (9)$$

где индексы пробегают значения $\alpha, \beta, \dots = 0, 1, 2, 3$, и

$$\hat{T}_\alpha^\beta = - \left[\left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial R} \right) R_\alpha^\beta - \frac{1}{2}\delta_\alpha^\beta \mathcal{F} + \left(\delta_\alpha^\beta g^{\mu\nu} - \delta_\alpha^\mu g^{\beta\nu} \right) \left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial R} \right)_{\mu\nu} \right] \quad (10)$$

ными данными [14-20]. Чтобы исследовать настоящее ускоренное расширение Вселенной, существуют некоторые диапазоны n , которые не противоречат наблюдательным космологическим данным. Поэтому представляется естественным рассматривать эти значения n для доменных стенок.

Мы остановимся на следующем выборе метрики для 4-мерной доменной стенки:

$$ds^2 = e^{2\beta(z)}(dt^2 - dx^2 - dy^2) - dz^2, \quad (12)$$

Подставив метрику (12) в формулы (9) и (10), можно получить следующие уравнения Эйнштейна:

$$e^{2\beta(z)} \left[3 \left(\frac{d\beta}{dz} \right)^2 + 2 \left(\frac{d^2\beta}{dz^2} \right) \right] = 6 \frac{d^4\beta}{dz^4} \mathcal{F}_{RR} + 36 \left(\frac{d^3\beta}{dz^3} \right)^2 \mathcal{F}_{RRR} + 36 \frac{d\beta}{dz} \left[8 \mathcal{F}_{RRR} \frac{d^2\beta}{dz^2} + \mathcal{F}_{RR} \right] \frac{d^3\beta}{dz^3} - \\ - \frac{1}{2} \left[-1152 \mathcal{F}_{RRR} \left(\frac{d\beta}{dz} \right)^2 - 48 \mathcal{F}_{RR} \right] \left(\frac{d^2\beta}{dz^2} \right)^2 - \frac{1}{2} \left[-96 \mathcal{F}_{RR} \left(\frac{d\beta}{dz} \right)^2 + 2 \mathcal{F}_R \right] \left(\frac{d^2\beta}{dz^2} \right) - \\ - 3 \left(\frac{d\beta}{dz} \right)^2 \mathcal{F}_R + \frac{\mathcal{F}}{2}, \quad (13)$$

$$3 \left(\frac{d\beta}{dz} \right)^2 = -3 \left(\frac{d\beta}{dz} \right)^2 \mathcal{F}_R - 3 \frac{d^2\beta}{dz^2} \mathcal{F}_R + \frac{\mathcal{F}}{2} + 72 \frac{d^2\beta}{dz^2} \left(\frac{d\beta}{dz} \right)^2 \mathcal{F}_{RR} + 18 \frac{d^3\beta}{dz^3} \frac{d\beta}{dz} \mathcal{F}_{RR}, \quad (14)$$

где первое уравнение соответствует (t) , (x) , (y) компонентам уравнения модифицированной теории гравитации, второе уравнение есть (z) компонента уравнения модифицированной теории гравитации. Вследствие тождества Бианки уравнение (13) является следствием уравнения (14). Нам удобнее исследовать последнее уравнение (14) 3-го порядка в силу того, что первые три уравнения (13) являются более сложными уравнениями 4-го порядка.

Скалярная кривизна R в метрике (12):

$$R = \alpha \left(\frac{d\beta}{dz} \right)^2 + 6 \left(\frac{d^2\beta}{dz^2} \right). \quad (15)$$

Таким образом, из (15) $\mathcal{F}(R)$:

$$\mathcal{F}(R) = -\alpha \left[\left(\frac{d\beta}{dz} \right)^2 + 6 \left(\frac{d^2\beta}{dz^2} \right) \right]^n. \quad (16)$$

Уравнение (14) после подстановки скалярной кривизны (16) принимает вид:

$$\beta''' - \frac{2(n-2)}{n(n-1)} \beta'^3 - \frac{4n^2 - 7n + 4}{n-n^2} \beta' \beta'' + \frac{1}{n} \frac{\beta''^2}{\beta'} + \\ + (12\beta'^2 + 6\beta'')^{-n} \frac{6\beta'(2\beta'^2 + \beta'')^2}{(n-1)\alpha} = 0. \quad (17)$$

Далее мы исследуем приближенное поведение решений уравнения (17) в точке $z = 0$. В начале координат, центр доменной стенки для уравнения (17) имеем следующее разложение в ряд Тейлора:

$$\beta[z] = \beta_0 + \gamma z^\delta + \dots \quad (18)$$

где β_0, γ, δ некоторые константы. Чтобы обеспечить регулярность решений в начале координат (в центре доменной стенки) мы собираем все слагаемые уравнения (17) со

степенями $z^{\delta-3}$ и приравниваем их к нулю. Выполнив вышесказанное, получим:

$$\frac{1}{n}(\delta - 1) = (\delta - 2) \quad (19)$$

После несложных вычислений получим условие для δ :

$$\delta = \frac{2n-1}{n-1}. \quad (20)$$

Также, чтобы обеспечить регулярность уравнения (17) необходимо чтобы β''' было бы конечным при $z \rightarrow 0$, что приводит к $\delta > 3$. Учитывая это условие находим, что решения могут существовать лишь когда n находится в следующем промежутке значений:

$$1 < n < 2. \quad (21)$$

Численное решение уравнения (17) приводит к результатам, приведенным на рисунках 1 и 2, где представлены фазовый портрет для 4-мерной доменной стенки (рис. 1а) и браны в 6-ти мерном пространстве – времени (рис. 1б), что позволяет сравнить полученные результаты с метрикой 5-ти мерной thick brane, рассмотренной в работах [1, 2].

Thick brane в 6-мерном пространстве-времени

В этой работе мы рассматриваем модель thick brane в 6-мерном пространстве – времени. Браны могут быть разделены на тонкие и thick brane. Тонкие браны имеют дельта-подобную локализацию материи на бране [21, 22]. С реалистической точки зрения, брана должна иметь некоторую толщину. Понятие «толщина» браны дает новые возможности и новые проблемы [23]. Брана должна удовлетворять двум главным требованиям: 1) решения должны

быть регулярными и либо асимптотически плоскими, либо иметь de Sitter (анти – de Sitter) асимптотику; 2) обычная материя должна быть локализована на бране. Большинство моделей тонких бран используют скалярные поля в рамках теории гравитации Эйнштейна [23]. Однако, можно было бы ожидать существование брано – подобных решений в вакууме также для некоторых видов модифицированных теорий гравитаций, называемых теориями гравитаций с высшими производными.

Гравитационное действие имеет следующий вид:

$$S = \int d^6x \sqrt{-g} \left[-\frac{R}{2} + \mathcal{F}(R) \right]. \quad (22)$$

После вариации гравитационного действия (22) относительно 6 -мерного метрического тензора g_{AB} мы получим аналогичные уравнения движения как и в предыдущих задачах (11, 12). Мы остановимся на следующем выборе метрики для thick brane:

$$ds^2 = e^{2\beta(z)}(dt^2 - dx^2 - dy^2 - dz^2 - dv^2) - dw^2, \quad (23)$$

где функция бега зависит только от пятой координаты z , это означает, что координаты $X = [t, x, y, z, v, w]$. Подставив метрику (23) в формулы (9) и (10) можно получить следующие уравнения движения:

$$\begin{aligned} 2e^{\beta(z)} \left[5 \left(\frac{d\beta}{dz} \right)^2 + 2 \left(\frac{d^2\beta}{dz^2} \right) \right] &= 10 \frac{d^4\beta}{dz^4} \mathcal{F}_{RR} + 100 \left(\frac{d^3\beta}{dz^3} \right)^2 \mathcal{F}_{RRR} + \\ &+ 100 \left(\frac{d\beta}{dz} \right) \left[12 \mathcal{F}_{RRR} \frac{d^2\beta}{dz^2} + \mathcal{F}_{RR} \right] \left(\frac{d^3\beta}{dz^3} \right) - \\ &- \frac{1}{2} \left[-7200 \mathcal{F}_{RRR} \left(\frac{d\beta}{dz} \right)^2 - 120 \mathcal{F}_{RR} \right] \left(\frac{d^2\beta}{dz^2} \right)^2 - \\ &- \frac{1}{2} \left[-480 \mathcal{F}_{RR} \left(\frac{d\beta}{dz} \right)^2 + 2 \mathcal{F}_R \right] \left(\frac{d^2\beta}{dz^2} \right) - 5 \left(\frac{d\beta}{dz} \right)^2 \mathcal{F}_R + \frac{\mathcal{F}}{2}, \end{aligned} \quad (24)$$

$$10 \left(\frac{d\beta}{dz} \right)^2 = -5 \left(\frac{d\beta}{dz} \right)^2 \mathcal{F}_R - 5 \frac{d^2\beta}{dz^2} \mathcal{F}_R + \frac{\mathcal{F}}{2} + 300 \frac{d^2\beta}{dz^2} \left(\frac{d\beta}{dz} \right)^2 \mathcal{F}_{RR} + 50 \frac{d^3\beta}{dz^3} \frac{d\beta}{dz} \mathcal{F}_{RR} \quad (25)$$

В нашей работе удобнее исследовать последнее уравнение (25) 3-го порядка в силу того, что первые три уравнения являются уравнениями 4- го порядка.

Метрика (23) имеет следующее выражение для скалярной кривизны R :

$$R = 30 \left(\frac{d\beta}{dz} \right)^2 + 10 \left(\frac{d^2\beta}{dz^2} \right). \quad (26)$$

Таким образом, из $\mathcal{F}(R) = -\alpha R^n$:

$$\mathcal{F}(R) = -\alpha \left[30 \left(\frac{d\beta}{dz} \right)^2 + 10 \left(\frac{d^2\beta}{dz^2} \right) \right]^n. \quad (27)$$

Используя выражение для $\mathcal{F}(R)$ из (27), мы получаем уравнение для метрической функции β :

$$\begin{aligned} \beta''' - \frac{3(n-3)}{n(n-1)} \beta'^3 - \\ - \frac{6n^2 - 10n + 6}{n-n^2} \beta' \beta'' - \frac{1}{n} \frac{\beta''^2}{\beta'} - \\ -(30\beta'^2 + 10\beta'')^{-n} \frac{20\beta'(3\beta'^2 + \beta'')^2}{(n-1)n\alpha} = 0. \end{aligned} \quad (28)$$

Исследуя аналогичным образом приближенное решение уравнений в нуле получим такие же ограничения на n :

$$\begin{aligned} 1 < n < 2, \\ \delta > 3. \end{aligned}$$

Численно решая все три уравнения для доменной стенки в 4-мерном пространстве – времени и thick brane в 5 и 6 – мерных пространствах – времени, можно получить фазовые портреты для всех трех моделей с $n =$

$5/3$ (рисунок 1) и график масштабных факторов (рисунок 2). Анализируя графики рисунка 2, можно рассмотреть поведение графиков функций a' , где a – масштабный фактор из уравнений (14), (17), (25).

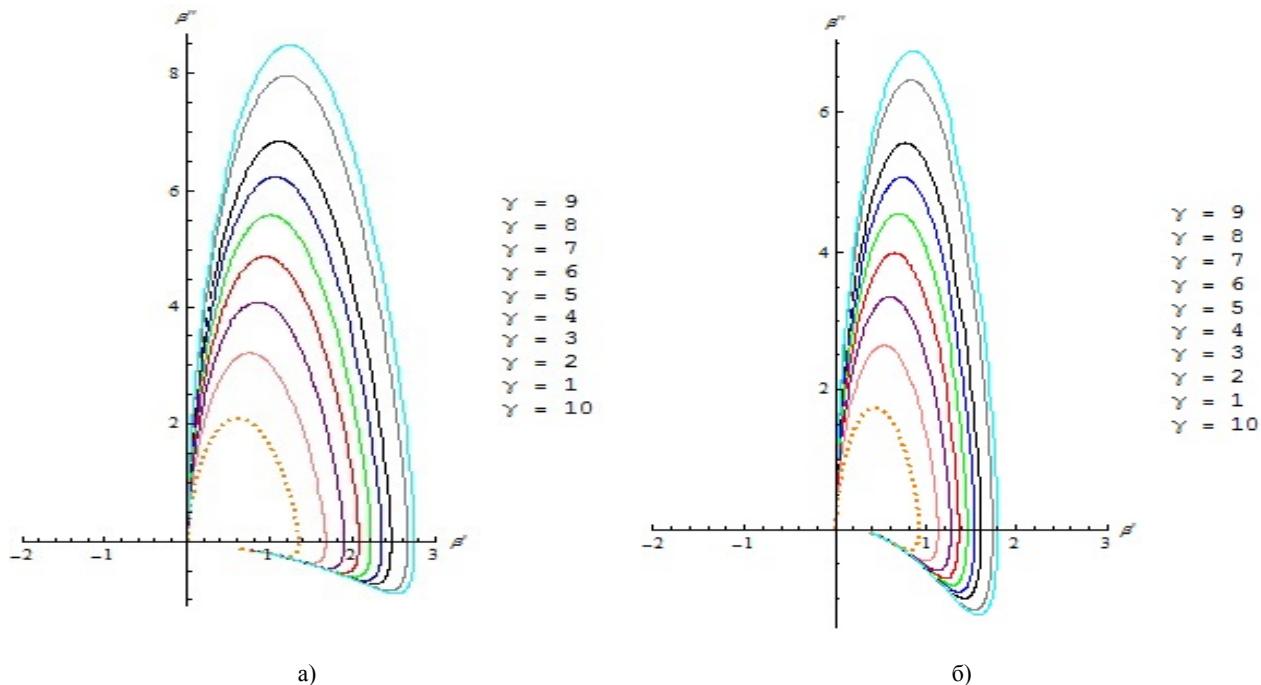


Рисунок 1 – Фазовый портрет для 4-мерной (а) и 6 мерной (б) браны с $n = 5/3$

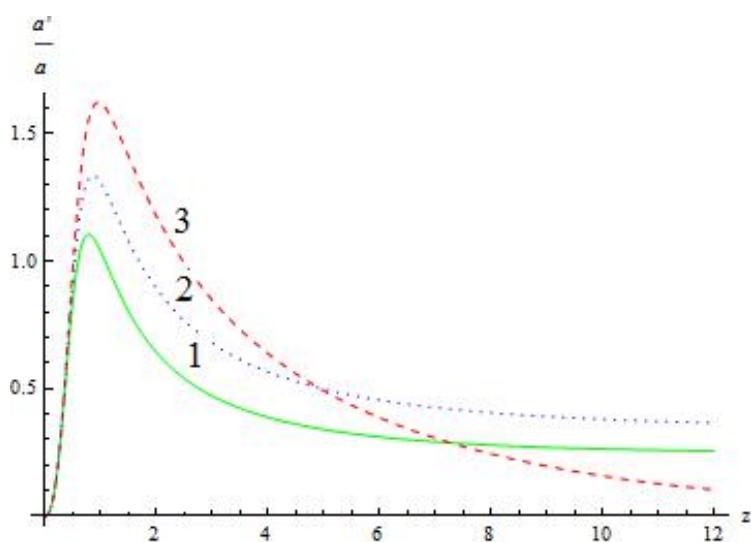


Рисунок 2 – Профиль функции $\frac{a'}{a}$, где $a = e^{\beta(z)}$, $n = \frac{5}{3}$, $\gamma = 2$, $\beta = \frac{7}{2}$;
1) 6 – мерные браны, 2) 4 – мерные доменные стенки, 3) 5-мерные браны

Заключение

Таким образом мы исследовали 4-мерные доменные стенки и 6-мерную thick brane в $-\alpha R^n$ гравитации. Были получены регулярные, плоско-симметричные решения в вакууме при определенных значениях параметра n и δ .

Полученные решения представляют большой интерес, так как являются вакуумными решениями, в отличие от аналогичных решений в общей теории относительности.

Авторы выражают благодарность гранту МОН РК, ИРН программы: BR 05236730, в рамках которого выполняется эта работа.

Литература

- 1 Dzhunushaliev V., Kim Sung-Won., Nurtayeva G.K., Protsenko N.A. and Idrissov A. Thick brane solutions in modified theories of gravity // Recent Contributions to Physics. – 2018. – Vol. 66, N. 3. – P. 12-20.
- 2 Dzhunushaliev V., Folomeev V., Kleihaus B., and Kunz J. Some thick brane solutions in $f(R)$ gravity // [arXiv:0912.2812]. – 2010.
- 3 Nojiri S., Odintsov S.D. and Tretyakov P.V. Dark energy from modified $f(R)$ -scalar-Gauss-Bonnet gravity // Phys. Lett.B. – 2007. – Vol. 651. – P.224 [arXiv:0704.2520].
- 4 De Felice A. and Tsujikawa S. $f(R)$ theories // Living Rev. Rel. – 2010. – Vol.13. – P.3; [arXiv:1002.4928 [gr-qc]].
- 5 Sotiriou T.P. and Faraoni V. $f(R)$ theories of gravity // Rev. Mod. Phys. – 2010. – Vol. 82. – P.451; [arXiv:0805.1726 [gr-qc]].
- 6 Buchdahl H. A. Non-linear Lagrangians and cosmological theory // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. – 1970. – Vol.150.
- 7 Starobinsky A. A. A new type of isotropic cosmological models without singularity // Physics Letters B. – 1980. – Vol.91. – P.99-102.
- 8 Starobinsky A.A. Dynamics of phase transition in the new inflationary universe scenario and generation of perturbations // Phys. Lett. B. – Volume 117, Issues 3–4, 11-1982, P.175-178.
- 9 Starobinsky A.A. The Perturbation Spectrum Evolving from a Nonsingular Initially De-Sitter Cosmology and the Microwave Background Anisotropy // Sov. Astron. Lett. – 1983. – Vol.9. – P.302.
- 10 Gurovich V.T. and Starobinsky A.A. Quantum effects and regular cosmological models // Sov. Phys. JETP B. – 1979. – Vol. 50. – P.844.
- 11 Starobinsky A.A. A new type of isotropic cosmological models without singularity // Phys. Lett. – 1980. – B 91. – P. 99.
- 12 Valtancoli P. Exactly solvable $f(R)$ inflation // [arXiv:1808.03087]
- 13 Kibble T.W.B. Topology of cosmic domains and strings // Phys. A: Math. Gen. – 1976. – Vol.9. – P.1387.
- 14 Capozziello S. Curvature Quintessence // Int. Journ. Mod. Phys. – 2002. – D 11. – P.483.
- 15 Capozziello S., Carloni S. and Troisi A. Quintessence without scalar fields // Recent Res. Devel. Astron. Astrophysics. – 2003. -Vol .1.-P.625.
- 16 Folomeev V., Gurovich V. and Tokareva I. Geometric model of Quintessence // Grav. Cosmol. – 2006.- Vol.12.-P.163.
- 17 Nojiri S. and Odintsov S. Where new gravitational physics comes from: M-theory // Phys. Lett. – 2003. – B 576. – P.5.
- 18 Nojiri S. and Odintsov S.D. The minimal curvature of the universe in modified gravity and conformal anomaly resolution of the instabilities // Mod. Phys. Lett. -2004. – A 19. – P.627.
- 19 Nojiri S. and Odintsov S.D. Modified gravity with negative and positive powers of the curvature: unification of the inflation and of the cosmic acceleration // Phys.Rev. – 2003. – D 68.-P.123512.
- 20 Nojiri S. and Odintsov S.D. Introduction to modified gravity and gravitational alternative for dark energy // ECONF – 2006. – C 0602061.
- 21 Randall L. and Sundrum R. A Large mass hierarchy from a small extra dimension // Phys. Rev. Lett. -1999. –V 83. – P.3370.
- 22 Randall L. and Sundrum R. An alternative to compactification // Phys. Rev. Lett. – 1999.-Vol. 83. – P.4690.
- 23 Dzhunushaliev V., Folomeev V. and M. Minamitsuji. Thick brane solutions // arXiv: 0904.1775.
- 24 Sakharov A. D. Vacuum quantum fluctuations in curved space and the theory of gravitation // Sov. Phys. Dokl. – 12. – 1968. P.-1040 // Dokl. Akad. Nauk.- Ser. Fiz.– 1967.Vol.177. –P. 70.
- 25 Ruzmaikina T. V. and A. A. Ruzmaikin. Quadratic corrections to the Lagrangian density of the gravitational field and the singularity // JETP. – 1970. – Vol. 30. – No. 2. – p. – 372.
- 26 Gurovich V.T. The nonlinear correction in the Lagrangian density of the gravitational field and cosmological solutions with no singularity // Dokl. Akad. Nauk SSSR. – 195. – 1970. – 1300 // Sov. Phys. Dokl. – 1971. – Vol.15. –P.1105.
- 27 Nariai H. On the removal of initial singularity in a Big-Bang Universe in terms of a renormalized theory of gravitation. Examination of the present status and a new approach // Prog. Theor. Phys. – 1971. – Vol.46.- P.433.
- 28 Gurovich V.T. and Starobinsky A.A. Quantum effects and regular cosmological models // Sov. Phys. JETP. – 1979.-Vol.50.-P.844.
- 29 Kaluza T. "Zum Unitätsproblem der Physik" Sitzungsberichte Preußische Akademie der Wissenschaften 966–972 (1921) <https://archive.org/details/sitzungsberichte1921preussi>.
- 30 Vilenkin A., Gravitational Field of Vacuum Domain Walls and Strings // Phys. Rev. D. – 1981. – Vol. 23. – P.852.
- 31 Natsuki Watanabe. Domain wall in $f(R)$ gravity // [arXiv:1203.5425 [physics.atom-ph]].

References

- 1 V. Dzhunushaliev, Kim Sung-Won., G.K. Nurtayeva, N.A. Protsenko, and A. Idrissov, Rec.Contr.Phys, 66 (3), 12-20 (2018)
- 2 V. Dzhunushaliev, V. Folomeev, B. Kleihaus and J. Kunz, arXiv: 0912.2812.
- 3 S. Nojiri, S.D. Odintsov and P.V.Tretyakov, Phys. Lett. B 651, 224 (2007).
- 4 A. De Felice and S. Tsujikawa, Living Rev. Rel. 13, 3 (2010). arXiv:1002.4928 .
- 5 T.P. Sotiriou and V. Faraoni, Rev. Mod. Phys. 82, 451(2010). arXiv:0805.1726 .
- 6 H. A. Buchdahl, Mon. Not. R. astr. Soc., 150, 1 (1970).
- 7 A.A. Starobinsky, Phys.Lett. B 91, 99 (1980). https://doi.org/10.1016/0370-2693(80)90670-X.
- 8 A.A. Starobinsky, Phys.Lett. B. (1982). https://doi.org/10.1016/0370-2693(82)90541-X.
- 9 A.A. Starobinsky, Soviet Astronomy Lett., 9, 302-304 (1983).
- 10 V.T. Gurovich and A.A. Starobinsky, Sov.Phys. JETP 50, 844 (1979).
- 11 H. Motohashi, A.A. Starobinsky, arXiv:1704.08188
- 12 P. Valtancoli, arXiv:1808.03087
- 13 T.W.B.Kibble, Journal of Physics A: Mathematical and General, 9 (8), 1387-1398 (1976).
- 14 S. Capozziello, Int. Journ. Mod. Phys. D 11. 483 (2002). DOI: 10.1142/S0218271802002025.
- 15 S. Capozziello, S. Carloni and A. Troisi, Recent Res. Devel. Astron.Astrophysics, 1, 625 (2003).
- 16 V. Folomeev, V. Gurovich, and I.Tokareva, Grav. Cosmol. 12. 163 (2006).
- 17 S. Nojiri and S. Odintsov, Phys. Lett. B 576, 5 (2003).
- 18 S. Nojiri and S.D. Odintsov, Mod. Phys. Lett. A 19, 627 (2004).
- 19 S. Nojiri and S. Odintsov, Phys.Rev. D 68 123512 (2003).
- 20 S. Nojiri and S.D. Odintsov, ECONF C 0602061 (2006).
- 21 L. Randall and R. Sundrum, Phys. Rev. Lett. 83, 3370 (1999).
- 22 L. Randall and R. Sundrum, Phys. Rev. Lett. 83, 4690 (1999).
- 23 V. Dzhunushaliev, V. Folomeev, and M. Minamitsuji, Thick brane solutions. arXiv: 0904.1775.
- 24 A.D. Sakharov, Sov. Phys. Dokl., 12 (1968) 1040 Dokl. Akad. Nauk Ser. Fiz., 177. 70. (1967).
- 25 T. V. Ruzmaikina, A. A. Ruzmaikin, JETP, 30, 372 (1970).
- 26 V.T. Gurovich, Dokl. Akad. Nauk SSSR 195 (1970) 1300, Sov. Phys. Dokl. 15. 1105. (1971).
- 27 H. Nariai, Prog. Theor. Phys. (Kyoto) 46, 433 (1971).
- 28 V.T. Gurovich and A.A. Starobinsky, Sov. Phys., JETP, 50, (1979).
- 29 T. Kaluza, Sitzungsber. Preuss. Akad. Wiss. Berlin. (Math. Phys.): 966–972. (1921).
e-Print: arXiv:1803.08616 physics.hist-ph
- 30 A. Vilenkin, Phys. Rev. D 23, 852 (1981).
- 31 Natsuki Watanabe, arXiv:1203.5425.

МРНТИ 41.29.21, 41.29.25

Чечин Л.М.^{1,2}, Курманов Е.Б.²

¹Астрофизический институт им. В.Г. Фесенкова, Казахстан, г. Алматы

²Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Казахстан, г. Алматы, e-mail: ergaly_90@mail.ru

О НОВОМ НАПРАВЛЕНИИ В ТЕОРИИ ГРАВИТАЦИОННОГО ЛИНЗИРОВАНИЯ

В данной работе дается краткий обзор состояния проблемы гравитационного линзирования. Данное исследование, как показывает анализ литературы, можно разделить на три части. Первая – изучает гравитационные линзы в пределах солнечной системы; вторая – гравитационные линзы в масштабах галактик и их скоплений; третья – исследование гравитационных линз в масштабе Вселенной.

Мы отмечаем, что дальнейшее исследование гравитационного линзирования в масштабе галактик и их скоплений следует рассматривать и с учетом наличия гало темной материи, включая его нестационарный характер.

Ключевые слова: гравитационные линзы, темная материя, гало темная материя.

Чечин Л.М.^{1,2}, Курманов Е.Б.²

¹Fesenkov Astrophysical Institute, Kazakhstan, Almaty

²Al-Farabi Kazakh National University, Kazakhstan, Almaty, e-mail: ergaly_90@mail.ru

On the new direction in the theory of gravitational lensing

In this paper provides a brief overview of the state of the gravitational lensing problem. Its research, as the analysis of the literature shows, can be divided into three parts. The first is studying gravitational lenses within the solar system, the second is gravitational lenses on the scales of galaxies and their clusters, the third is the study of gravitational lenses on the scales of the Universe.

We note that further study of gravitational lensing on the scales of galaxies and their clusters should be considered taking into account the presence of dark matter halo, including its non-stationary nature.

Key words: gravitational lenses, dark matter, dark matter halo.

Чечин Л.М.^{1,2}, Құрманов Е.Б.²

¹В.Г Фесенков атындағы астрофизика институты, Қазақстан, Алматы к.

²әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Қазақстан, Алматы к., e-mail: ergaly_90@mail.ru

Гравитациялық линзалану теориясындағы жаңа бағыт туралы

Бұл жұмыста гравитациялық линзалану мәселеінде күйіне қысқаша шолу жасалынады. Оны зерттеу, әдебиеттерді талдау көрсетіп отыргандай, уш бөлікке бөлуге болады. Бірінші – гравитациялық линзаларды күн жүйесі шегінде зерттеу, екінші – гравитациялық линзаларды галактикалар мен олардың шоғырлануындағы масштабтарда зерттеу, үшінші – гравитациялық линзаларды Әлемнің масштабтарында зерттеу.

Гравитациялық линзаларды галактикалармен және олардың шоғырлануындағы масштабтарында одан әрі зерттеу үшін қараңғы материяның галосы мен оның стационар еместігін ескере отырып қарастыру керек.

Түйін сөздер: гравитациялық линзалар, қараңғы материя, қараңғы материяның галосы.

Введение

После создания ОТО возникли вопросы по ее экспериментальной проверке. Классическими экспериментами являются смещение частоты в гравитационном поле, смещение перегелия Меркурия в гравитационном поле Солнца, а также отклонение лучей света в центрально-симметричном гравитационном поле (поле Шварцшильда) [1]. Этот эффект стал началом исследований по гравитационным линзам, включающие как слабое, так и сильное линзирование. Семейство гравитационных линз было расширено до вращающихся тел, заряженных тел, до нескольких тел и.т.д.

Важный этап в изучении гравитационных линз был связан с новыми представлениями о материальной структуре Вселенной. К числу новых субстанций во Вселенной, относится темная энергия и темная материя. Темная энергия в космологии – гипотетическая форма энергии, имеющая отрицательное давление и равномерно заполняющая все пространство Вселенной. Она не собирается в сгустки. Согласно ОТО, гравитация зависит не только от массы, но и от давления, причем отрицательное давление должно порождать отталкивание, антигравитацию [2].

Другой актуальной проблемой современной космологии, как отмечено выше, является темная материя. Астрономические наблюдения показывают, что темная материя в основном концентрируется вокруг крупномасштабных космических объектов типа галактик и их кластеров.

В начале прошлого века астрономы установили, что некоторые звезды и галактики ведут себя иначе, чем предсказывала теория.

Вращение более удаленных частей галактик не поддавалось законам небесной механики. Это положило начало поискам новой, скрытой массы, которую впоследствии назвали темной материи.

Основные проявления темной материи – необычно большие отношения масса – светимость в группах и скоплениях галактик, плоские кривые вращения на периферии дисковых галактик и избыточное гравитационное линзирование объектов заднего фона на скоплениях галактик [3].

Существует несколько способов измерения гравитационного поля в скоплениях галактик, один из которых – гравитационное линзирование.

Распределение темной материи наблюдают по сильному и слабому гравитационному линзированию – появлению множественных изображений галактик и искажению их формы. Одной из первых книг, в которой дается изложение физики гравитационных линз, является монография [4]. К счислу недавних статей посвященных гравитационному линзированию относятся, например, следующие работы.

В работе [5] в метрике Фридмана-Робертсона-Уокера была вычислена слабая картина линзирования, возникающая из крупномасштабной структуры для произвольной Ω_0 и нулевой космологической константы Λ . Для данной космологической модели заданной Ω_0 и спектр мощности флуктуаций плотности, автором вычислены статистические свойства поля поляризации для произвольного распределения красного смещения источника в простой замкнутой форме.

$$\begin{aligned}
 \sigma_p^2(0) &= C_{pp} \approx 36\pi^2 \left(2 \left[1 - (1+z)^{-1/2} \right]^3 \Omega_0^2 \left(\frac{1+z}{1+\Omega_{0z}} \right)^2 \int_0^\infty dk k P(k) \right) \text{ для } z \leq 1, \\
 \sigma_p^2(0) &= C_{pp} \approx 36\pi^2 z^3 (1 + 2(1-\Omega_0)z) \Omega_0^2 \int_0^\infty dk k P(k) \quad \text{для } z \gg 1 \\
 C(\Omega_0, z) &\approx \Omega(\Omega_0, z) = \frac{\Omega_0 + \Omega_0 z}{1 + \Omega_0 z} \\
 Q(\sigma) &= \frac{1}{2} \int_0^\infty d\theta \theta C_{pp}(\theta) J(\sigma\theta) = 18\pi \Omega_0^2 \int_0^{2/\Omega_0} dx x f^2(x) \omega^2(x) P(x) \\
 \frac{Q(\sigma)}{\sigma} &= \frac{9\Omega_0^2}{8\pi G^2} \int_{\frac{\sigma\Omega_0}{2}}^\infty dk k f(k) \omega^2(k) P(k) k^2
 \end{aligned} \tag{1}$$

где z – красное смещение, C – коррекция кривизны, C_{pp} – корреляционная функция, $Q(\sigma)$ – спектр мощности поляризационных флуктуаций. (1) показывает, что вклад в спектр мощности поляризационных флуктуаций при обратном угле σ от структуры на расстоянии x исходит из спектра мощности флуктуации

$$\begin{aligned} x^I(\vec{\theta}) = \int_0^{x_s} d\chi (\chi_s - \chi) = & \left(\frac{U_N^I}{c^2} + \frac{V_N^I}{c^2} \right) + \frac{2}{c^4} (U_p + V_p)^I + \\ & + \frac{(U_N + V_N)^J}{c^4} \int_0^x (\chi - \chi') [U_N^J + V_N^J] d\chi' + \frac{B_3^J}{c^3} + \frac{\alpha \dot{B}^I}{c^4} + \frac{h_{33}^J}{2c^4} \end{aligned} \quad (2)$$

(2) уравнение является основным результатом данной работы. Он содержит все термины, которые требуется для полного описания угла отклонения слабой линзы до порядка c^{-4} на нелинейных шкалах.

В работе [7] рассмотрен изгиб света в более общем случае гравитирующего объекта на космологическом фоне с переменной скоростью расширения $H(t)$. Сохранив значения расстояний от наблюдателя до объекта линзирования и до фиксированного источника, авторы построили зависимость угла изгиба, измеренного двумя различными наборами наблюдателей в этом пространстве-времени, от скорости изменения $H(t)$:

$$H(t) = H_0 + A(t - t_0) \quad (3)$$

$$\theta_M = \sqrt{\left(1 - \frac{2m}{r_L} - H_0^2 r_L^2\right)} \frac{4mr_{SL}}{r_L r_S} \quad (4)$$

$$\theta_E = \sqrt{\frac{4mr_{SL}}{r_L r_S}} \quad (5)$$

где $r_S = r_{SL} + r_L$, r_{SL} – расстояние от источника до объекта, r_L – расстояние от наблюдателя до объекта, $H(t)$ – параметр Хаббла.

А в [8] показаны результаты приближения тонкой линзы на основе модифицированного профиля плотности Наварро-Френка-Уайта на фоне метрики Фридмана-Робертсона-Уокера.

плотности при волновых числах больше чем σ/x . В [6] исследуется слабое космологическое линзирование в нелинейных масштабах. Авторами рассчитан полный угол отклонения слабой линзы вплоть до порядка c^{-4} . Получен полный набор уравнений для вычисления всех возможных членов линзирования.

$$\hat{\alpha} = \frac{4M_{\text{sing}}}{xR_S} + 16\pi\rho_b\delta_c \frac{R_s^2}{x} \left(\log \frac{x}{2} + F(x) \right) \quad (6)$$

где

$$F(x) = \begin{cases} \frac{\arctan h(\sqrt{1-x^2})}{(\sqrt{1-x^2})}, & x < 1 \\ 1, & x = 1 \\ \frac{\arctan(\sqrt{x^2-1})}{(\sqrt{x^2-1})}, & x > 1 \end{cases} \quad (7)$$

A

$$\begin{aligned} \rho(R, t_1) = \rho_b(t_1) & \left[\left(\delta_1 e^{-\left(\frac{R}{R_0}\right)^2} - b_1 \right) e^{-\left(\frac{R}{R_0}\right)^2} + 1 \right], \\ \rho(R, t_2) = (\rho_{NFW} - b_2 \rho_b(t_2)) & e^{-\left(\frac{R}{R_0}\right)^2} + \rho_b(t_2), \end{aligned} \quad (8)$$

$$\rho_{NFW} = \rho_b(t_2) \frac{\delta_c}{\left(\frac{R}{R_S}\right) \left(1 + \frac{R}{R_S}\right)^2}.$$

Барионные гравитационные линзы

Эффект гравитационной линзы был предсказан А. Эйнштейном, который в рамках общей теории относительности впервые правильно вычислил угол отклонения луча света в гравитационном поле [9, 10]. Закон об отклонении луча света в гравитационном поле:

$$\theta = \frac{2GM}{c^2 R}, \quad (9)$$

где G – гравитационная постоянная, c – скорость света, M и R – соответственно масса и радиус гравитационного шара. Одним из первых специалистов, кто исследовал гравитационные линзы был казахстанский астрофизик Г.А. Тихов [4].

Известно, что гравитационные линзы позволяют получить независимую от других методов исследований, оценку величины постоянной Хаббла, позволяет оценить массы гравитационных линз, большая часть которой излучает мало электромагнитной энергии для того, чтобы быть обнаруженной с помощью стандартных астрономических методов. С помощью этого метода можно восстановить распределение поверхностной плотности удаленных скоплений галактик.

Сейчас известно уже несколько надежных гравитационных линз. В основном это далекие квазары ULAS J1342+0928, ULAS J1120+0641 изображения которых размножены попадающими на луч зрения более близкими галактиками.

В конце 80-х годов стали наблюдаться гравитационные линзы на скоплениях галактик. При этом было обнаружено, что слабые голубые галактики, находящиеся за линзирующим скоплением, имеют вытянутые дугообразные формы. Изучая изображения этих галактик, искаженные скоплением, можно сделать вывод о распределении вещества в скоплении и о его полной массе. Когда в качестве линзы выступает целая галактика или скопление галактик, свет проходит сквозь саму линзу.

Исследование гравитационных линз дает важную информацию для обнаружения темной материи. Обзор современных представлений о составе и природе темной материи дан в недавних работах [11-24]. В этих статьях авторы также обсуждают различные способы прямого и косвенного детектирования темной материи. В них обосновывается, что подавляющая часть

темной материи имеет небарионную природу и практически не взаимодействует с барионной материи отличными от гравитации способами.

О гравитационном линзировании в пространстве – времени – де Ситтера

Наша Вселенная, как показывают многочисленные исследования [25], обладает рядом глобальных внешних физических характеристик. К ним, в частности, относятся расширение Вселенной, ускоренное расширение Вселенной и вращение Вселенной. Эти свойства Вселенной можно объяснить на базе концепции космического вакуума [26]. Так что в качестве метрики пространства-времени Вселенной выберем метрику де Ситтера.

В дальнейшем будем считать, что свет распространяется в плоскости $\theta = \pi/2$, а само пространство – время приближенно является сферически – симметричным, так что можно считать $\varphi = 0$. При этих условиях метрика де Ситтера приобретает следующий вид:

$$ds^2 = \left(1 + \frac{2M}{r} + \frac{\Lambda r^2}{3} + \right) dr^2 + \\ + \left(-1 + \frac{2M}{r} + \frac{\Lambda r^2}{3} + \right) dt^2. \quad (10)$$

где M – масса галактики или их скопления.

Используя метод, изложенный в работах [27-28], можно показать, что ей соответствует показатель преломления гравитационного поля:

$$n \approx 1 + \frac{2M}{r} + \frac{\Lambda r^2}{3}. \quad (11)$$

Отсюда легко вычислить угол отклонения лучей света. Он имеет вид:

$$\theta \approx \frac{4M}{p} + \frac{2\Lambda p^2}{3}, \quad (12)$$

в котором выписаны слагаемые, обусловленные массой гравитирующего объекта и космологическим Λ – членом.

Для дальнейшего обсуждения выберем следующие скопления в сверхскоплении Девы:

Таблица 1 – Радиус, масса скопления галактик

Название	$r \cdot 10^{25} \text{ см}$	$m \cdot 10^{49} \text{ г}$
Скопление NGC 7582	9.00	1.20
Скопление NGC 5033	7.20	1.00
Скопление NGC 2997	14.40	5.00
Скопление NGC 1023	17.10	6.00
Скопление Девы III	6.30	0.80
Скопление Дракона	12.00	1.55
Скопление Золотой Рыбы	16.00	5.50

Опираясь на значения этих параметров и величину космологического члена $\Lambda = 10^{-56} \text{ см}^{-2}$, оценим их наибольшие вклады в показатель преломления (12).

Таблица 2 – Вклады – показатель преломления скопления галактик

Название	$(2M/r) \cdot 10^{-5}$	$(\Lambda r^2/3) \cdot 10^{-5}$
Скопление NGC 7582	1.97	2.70
Скопление NGC 5033	2.05	1.73
Скопление NGC 2997	5.14	6.91
Скопление NGC 1023	5.19	9.75
Скопление Девы III	1.88	1.32
Скопление Дракона	1.85	4.80
Скопление Золотой Рыбы	5.08	8.53

Поэтому углы отклонения лучей света будут соответственно равны:

Таблица 3 – Показатель преломления скопление галактик и угол отклонения лучей света

Название	$n \cdot 10^{-5}$	θ
Скопление NGC 7582	4.67	9.34"
Скопление NGC 5033	3.78	7.56"
Скопление NGC 2997	12.05	24.10"
Скопление NGC 1023	14.94	29.88"
Скопление Девы III	3.20	6.40"
Скопление Дракона	6.65	13.30"
Скопление Золотой Рыбы	13.61	27.22"

Заключение

В работе дается обзор некоторых теоретических исследований гравитационного линзирования, включая результаты отечественных исследований. При этом была подчеркнута тенденция исследования гравитационного линзирования с учетом вероятной нестационарности параметра Хаббла. Умонастроение этих работ позволяет думать о целесообразности рассмотрения

временной переменности и других космологических параметров в теории гравитационного линзирования. В частности, речь может идти о нестационарности гало темной материи. Необходимость такого рассмотрения обусловлена тем, что масса гало галактики составляет ее большую часть (порядка 90 % всей ее массы). Целью наших исследований является формирование теории гравитационного линзирования при заданной (новой) нестационарности темной материи.

Литература

- 1 Byrd Gene G., Chernin Arthur D., Valtonen Mauri Cosmology: Foundations and Frontiers . – 2007. – 488 p.
- 2 Сажин М.В. Современная космология. – М.: Едиториал УРСС, 2002. – 240 с.
- 3 www.astronet.ru
- 4 Блиох П.В., Минаков А.А. Гравитационные линзы. – Киев: Наука, 1989. – 41 с.
- 5 Villumsen, Jens Verner Weak lensing by large-scale structure in open, flat and closed universes // Monthly Notices of Royal Astronomical Society. – 1996. – Vol.281. – Iss. 2 P.369–83, 9.
- 6 Thomas D.B., Bruni M., Wands D. Relativistic weak lensing from a fully non-linear cosmological density field. //Journal of Cosmology and Astroparticle Physics. – 2015. – Sep 8. –2015(9). – P.021.
- 7 Mir Emad Aghili, Brett Bolen, Luca Bombelli Effect of accelerated global expansion on the bending of light // General Relativity and Gravitation. – 2014. – Vol.49(1).
- 8 Mood M. Parsi, Firouzjaee Javad T., Mansouri Reza Gravitational lensing by a structure in a cosmological background // Physical Review D. – 2013. – Vol. 88(8).
- 9 Захаров А. Ф. Гравитационные линзы и микролинзы. – М.: Янус-К, 1997. – 328 с.
- 10 Блиох П.В., Минаков А.А. Гравитационные линзы. – М.: Знание, 1990. – 64 с.
- 11 Schaf Jacob, // J. Modern Phys. – 2015. – Vol. 6. – P. 224 -238
- 12 Cheung C., Sanford D. // Journal of Cosmology and Astroparticle Phys. – 2014. – Vol.02. id. 011.
- 13 Jennifer M. Gaskins A review of indirect searches for particle dark matter // Contemporary Physics. – 2016. – P.32.
- 14 Antonov A. A. Nature of Dark Matter and Dark Energy // Journal of Modern Physics. – 2017. – Vol. 8. – P. 567-582.
- 15 Marrodan Undagoitia Teresa, Rauch Ludwig Dark matter direct-detection experiments // J. Phys. G43. – 2016. – №1.
- 16 Michael Klasen, Martin Pohl, Günter Sigl Indirect and direct search for dark matter // Progress in Particle and Nuclear Physics. – 2015. – P. 74.
- 17 Auguste Meessen Astrophysics and Dark Matter Theory // Journal of Modern Physics. – 2017. – Vol.8. – № 2.
- 18 Gianfranco Bertone, Dan Hooper A History of Dark Matter ev. // Mod. Phys. 90. – 2018.
- 19 Xiao-Jun Bi, Peng-Fei Yin, Qiang Yuan Status of dark matter detection // Front. Phys. – 2013. – Vol. 8(6). – P. 794–827.
- 20 C. Jess Riedel Direct Detection of Classically Undetectable Dark Matter through Quantum Decoherence // Phys. Rev. D 88. – 2013.
- 21 Baudis Laura Dark matter searches //Annalen der Physik. – 2015. – Vol. 528. – Iss. 1-2. – P. –74-83.
- 22 Grijalva-Castillo, Sergio Calcaneo-Roldan Gravitational Lensing by Dark Matter Halos // APS March Meeting. – 2018. – abstract id.G60.010.
- 23 Nunez Darío Discussion on dark matter nature // AIP Conference Proceedings. – 2014. – Vol. – 1577. – Iss. 1. – P. 208-212.
- 24 Mayet F., Green A.M., JBattat. B.R., Billard J., Bozorgnia N., Gelmini G.B., Gondolo P., Kavanagh B.J., Le S.K.E, Loomba D., Monroe J., Morgan B., O'Hare C.A J., Peter A.H.G., Phan N.S., Vensen S.E. Indirect and direct search for dark matter // Physics Reports. – 2016. –Iss. 1.
- 25 Chechin L.M. The Universe Evolution – Global Astrophysical Properties in The Universe Evolution – Astrophysical and Nuclear Aspects // Nova Science Publishers. – 2013. – p. 429-470.
- 26 Чечин Л.М. Космический вакуум и вращение галактик // Астрономический журнал. – 2010. – Т. 87. – №8. – С. 784-789.
- 27 Иваницкая О.С. Лоренцев базис и гравитационные эффекты в эйнштейновой теории тяготения. – М.: «Наука и техника», 1979. – С. 14-18.
- 28 Чечин Л.М., Авхунбаева Г.М. Двухкомпонентная гравитационная линза // Известия ВУЗов. Физика. – 2013. – Т. 56. – С. 30-35.

References

- 1 Byrd Gene G., Chernini Arthur D. and Valtonen Mauri Cosmology: Foundations and Frontiers, 2007, 488 p.
- 2 Sazhin M.V. Sovremennaja kosmologija, (Moscow: Editorial URSS, 2002), 240 (in Russ)
- 3 www.astronet.ru
- 4 P.V. Blion and A.A. Minakov Gravitacionnye linzy, (Kiev: Nauka, 1989), 41. (in Russ)
- 5 Villumsen Jens Verner, Monthly Notices of the Royal Astronomical Soc.B28, 369–83, (1996).
- 6 D.B. Thomas, M. Bruni and D. Wands J. of Cosmology and Astroparticle Phys. 2015(9). 021 (2015).
- 7 Mir Emad Aghili, Brett Bolen and Luca Bombelli General Relativity and Gravitation, B49(1) (2014).
- 8 Mood M. Parsi, Firouzjaee Javad T. and Mansouri Reza Physical Review D., B.88(8), (2013).
- 9 A.F. Zaharov Gravitacionnye linzy i mikrolinzy (Moskva: Janus-K, 1997), 328. (in Russ)
- 10 P.V. Blion and A.A. Minakov Gravitacionnye linzy (Moskva: Znanie,1990), 64. (in Russ)
- 11 Schaf Jacob, J. Modern Phys., B 6., P. 224 -238 (2015).
- 12 C. Cheung and D. Sanford, J. of Cosmology and Astroparticle Phys. B 02, (2014).
- 13 M. Jennifer Gaskins Contemporary Phys. P.32, (2016).
- 14 A.A. Antonov, J. of Modern Phys., B8., 567-582 (2017).
- 15 Marrodan Undagoitia Teresa, J. Phys. G43., 1, (2016).
- 16 Michael Klasen, Martin Pohl and Günter Sigl, Progress in Particle and Nuclear Phys. 74, (2015).
- 17 Auguste Meessen, J. of Modern Phys. B.8, 2 (2017)

- 18 Gianfranco Bertone and Dan Hooper, Mod. Phys. 90. (2018).
- 19 Xiao-Jun Bi, Peng-Fei Yin and Qiang Yuan, Front. Phys. B. 8(6), 794–827, (2013).
- 20 C. Jess Riedel, Phys. Rev. D 88 (2013).
- 21 Baudis Annalen der Physik. B. 528, 1-2, 74-83 (2015).
- 22 Grijalva-Castillo and Sergio Calcareo-Roldan, APS March Meeting. 2018, abstract id.G60.010.
- 23 Nunez Darío, AIP Conference Proceedings. B. 1577, 1, 208-212 (2014).
- 24 F. Mayet, A.M. Green, J.B.R. Battat, J. Billard, N. Bozorgnia, G. B. Gelmini, P. Gondolo, B. J. Kavanagh, S. K. Lee, D. Loomba, J. Monroe, B. Morgan, C. A. J. O'Hare, A. H. G. Peter, N. S. Phan and S. E. Vensen, Phys. Reports. (2016).
- 25 L.M. Chechin, Nova Science Publishers, 429-470 (2013).
- 26 L.M. Chechin, Astronomicheskij zhurnal. 8, 784-789 (2010). (in Russ)
- 27 O.S. Ivanickaja, Lorencev bazis i gravitacionnye jeffekty v jejnshtejnovoj teorii ttagoteniya, (Nauka i tehnika, 1979), 14-18. (in Russ)
- 28 L.M. Chechin and G.M. Avhunbaeva, Izvestie VUZov, 30-35 (2013). (in Russ)

МРНТИ 41.03.15

Минглибаев М.Дж., Шомшекова С.А.

Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Казахстан, г. Алматы

Астрофизический институт им. В.Г. Фесенкова, Казахстан, г. Алматы

e-mail: minglibayev@gmail.com, shomshekova.saule@gmail.com

**СТАТИСТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ЭКЗОПЛАНЕТНЫХ СИСТЕМ
ПО СПЕКТРАЛЬНЫМ КЛАССАМ ЦЕНТРАЛЬНЫХ ЗВЕЗД**

Исследование экзопланетных систем является актуальным направлением, оно увеличило наши представления о Вселенной и дало дополнительные возможности изучение физических и динамических свойств планетных систем. В настоящее время подтвержденных экзопланет около 4000. Целью настоящей работы является выявления некоторых статистических закономерностей экзопланетных систем путем статистического анализа по последним данным европейского каталога по экзопланетным системам. Такой анализ необходим для дальнейшего исследования экзопланетных систем, особенно при изучении динамической эволюции в этапе нестационарности. В связи с развитием инструментальной базы и улучшением методов поиска обнаруживаются планеты землеподобного типа, как каменистая планета Ross 128 b. Мы выполнили статистический анализ по количеству экзопланет в зависимости от спектрального класса центральной звезды. Оказалось, что большинство известных экзопланет вращается вокруг звезд спектральных классов F, G, K и M. Мы выявили, что звезды класса G имеют наибольшее количество экзопланетных систем, соответственно спектральный класс G имеет наибольшее количество экзопланет. По значениям эффективной температуры центральной звезды по нашей статистической диаграмме можно определить, к какому классу относится та или иная звезда, вокруг которой вращается экзопланета. Интересно, у большинства экзопланет наклонения лежат между 80 и 95 градусами, при этом эксцентриситеты могут быть различными. Также построено распределение экзопланет по аргументу перицентра и по наклонению орбит.

Ключевые слова: экзопланетные системы, центральная звезда, спектральный класс, переменность масс, орбитальные элементы, статистический анализ.

Minglibayev M.Zh., Shomshekova S.A.
Al-Farabi Kazakh National University, Kazakhstan, Almaty
Fesenkov Astrophysical Institute Kazakhstan, Almaty,
e-mail: minglibayev@gmail.com, shomshekova.saule@gmail.com

Statistical analysis of exoplanet systems by spectral classes of central stars

The study of exoplanetary systems is an important field of research, which increased our understanding of the universe and gave additional opportunities to study the physical and dynamic properties of planetary systems. To this day the list of confirmed exoplanets are near 4000. The purpose of this work is to identify some of the static patterns of exoplanetary systems by statistical analysis according to the latest European catalog data on exoplanetary systems. Such an analysis is necessary for the further study of exoplanetary systems, especially when studying the dynamic evolution in the nonstationary stage. In connection with the development of the instrumental base and the improvement of the search methods, earth-like planets are discovered, like the rocky planet Ross 128b. We performed a statistical analysis of the number of exoplanets depending on the spectral class of the central star. It turned out that most of the known exoplanets revolve around stars of the F, G, K and M spectral classes. We have revealed that stars of class G have the greatest number of exoplanetary systems, respectively the spectral class G has the greatest number of exoplanets Interestingly, most exoplanets have inclinations between 80 and 95

degrees, while eccentricities can be different. The distribution of exoplanets were constructed according to the argument of the pericenter and the inclination of the orbits.

Key words: exoplanetary systems, spectral class, central stars, mass variability, orbital elements, statistical analysis.

Минглибаев М.Дж., Шомшекова С.А.

әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Қазақстан, Алматы қ.
Б.Г. Фесенков атындағы Астрофизика институты, Қазақстан, Алматы қ.
e-mail: minglibayev@gmail.com, shomshekova.saule@gmail.com

Экзопланеталық жүйелердің орталық жұлдыздарының спектрлік классы бойынша статистикалық талдауы

Экзопланеталық жүйелерді зерттеу қазіргі кезде өзекті болып табылады және ғаламды түсінуге және физикалық, динамикалық зерттеулер үшін қосымша мүмкіндіктер берді. Бұл жұмыстың мақсаты экзопланеталық жүйелер бойынша еуропалық каталогтың соңғы деректері арқылы статистикалық талдаулар жүргізу болып табылады. Қазіргі уақытта бекітілген экзопланеталық жүйелер шамамен 4000 құрайды. Бұл мақаладағы статистикалық талдаулар экзопланеталық жүйелердің динамикалық эволюциясын одан әрі қарай зерттеуге қажет. Техникалық базаның дамуы және экзопланеталық жүйелерді іздеу әдістерінің дамуына байланысты, жер тәрізді планеталар Ross 128 b табылды. Орталық жұлдыздың спектрлік класына тәуелді экзопланеталар санына статистикалық талдау жүргізілді. Белгілі экзопланеталардың көбісі F, G, K және M спектрлік жұлдыздарының айналасындағы планеталар. Біз G класындағы жұлдыздардың айналасында экзопланеталық жүйелер саны көп екендігін анықтадық. Орталық жұлдыздың эффективті температура мәндеріне сәйкес, біздің статистикалық диаграммамыздан, экзопланета қандай спектрлік кластиғы жұлдыздың маңында айналатындығына көз жеткізуге болады. Бір қызығы, экзопланеталардың көшшілігі 80-нен 95 градусқа дейінгі көлбеулікке ие, ал эксцентрикситеттері әртүрлі болуы мүмкін. Сонымен қатар, экзопланеталардың аргумент перицентрі және көлбеулік шамалары бойынша диаграмма тұрғызылды.

Түйін сөздер: экзопланеталық жүйелер, спектрлік клас, орталық жұлдыз, айнымалы масса, орбиталық элементтер, статистикалық талдау.

Введение

Исследования экзопланетных систем в настоящее время является актуальным направлением в астрономии и небесной механике. Основная задача в изучении экзопланет – выявления закономерностей образования и эволюция планетных систем. Открытие и подтверждение экзопланетных систем в основном были выполнены космическими телескопами. Первая экзопланета 51 Peg b и ее центральная звезда 51 Peg в созвездии Пегаса была открыта в 1995 году [1]. К настоящему времени вне Солнечной системы известных, подтвержденных экзопланетных систем более 4000 [2]. В экзопланетных системах распределения центральной звезды, по видимому, не охватывает всех спектральных классов звезд. К тому же есть ряд интересных звезд с планетными системами спектральный класс которых четко не определен.

Представляет интерес анализ распределение центральной звезды экзопланетных систем по спектральным классам и анализ соответствующей экзопланетной системы в связи с свойствами родительской звезды особенности характе-

ристики планет входящие в эту систему. Особое внимание будет уделены нестационарным звездам, которые меняют массу со временем из-за корпускулярного излучение [4-9]. Как известно, звезды до сорока процентов исходной массы возвращают обратно в космос в виде пыли и излучения [8].

Известно, что звезды рождаются из большого газо-пылевого облака в результате процесса вращения и гравитационного сжатия и дальнейшего его уплотнения. Формирующаяся звезда окружена газо-пылевым диском, в котором медленно устанавливается равновесие между силой гравитации и давлением газа. Внутренняя температура звезды увеличивается, и запускается процесс термоядерного синтеза, в результате чего звезда «зажигается». Одновременно в диске формируются первые небольшие протопланеты. Когда звезда полностью сформирована, а из диска постепенно выветривается газ и пыль, превращаясь в тысячи мелких протопланет. С течением времени в результате столкновения протопланет и образования сферических тел больших размеров возникают планеты [10-11]. Рабочей группой Международного Астрономического союза

(MAC), было предложено ввести границу по массе между планетами и звездами ($M = 13$ масс Юпитера). Эта масса считается достаточной для поддержания реакции горения водорода. Иными

словами, планета – это объект с массой, меньшей 13 масс Юпитера (масса Юпитера $2 \cdot 10^{27}$ кг), а объект с большой массой считается коричневым карликом или звездой [1].

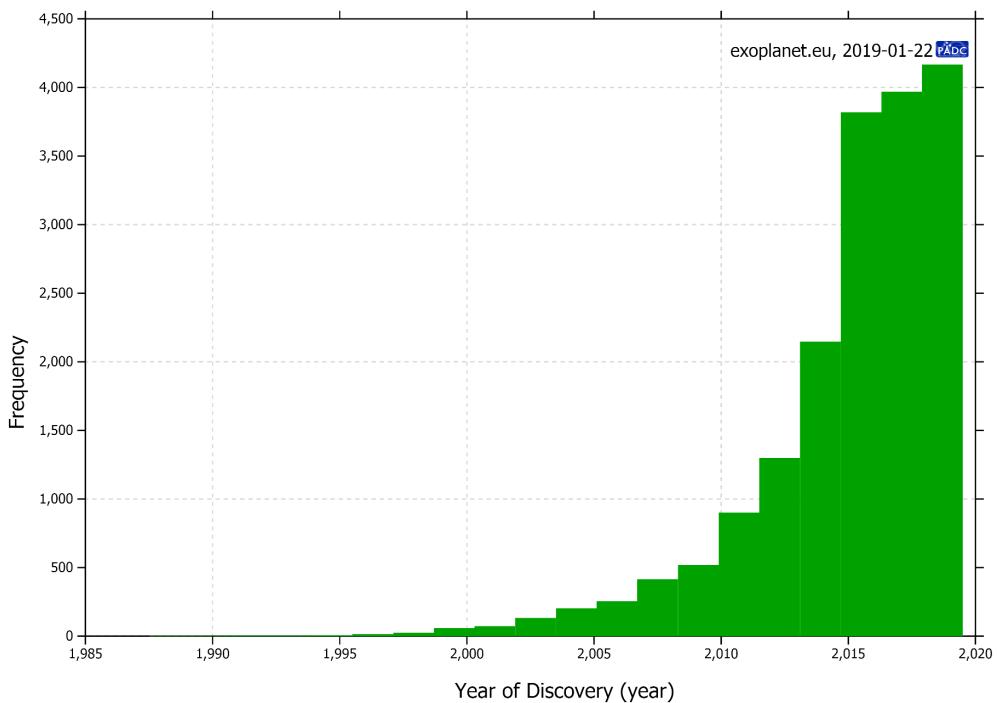


Рисунок 1 – Кумулятивные результаты количества экзопланет, открытых для каждого года

Основные методы обнаружения экзопланет

Методов обнаружения экзопланетных систем очень много. Но есть основные методы, с помощью которых обнаружено наибольшее количество экзопланет. Многие из этих методов оказались достаточно трудоемкими – требующими особых условий наблюдений (очень высокого разрешения, высокой точности определения координат и т.д.). Наиболее эффективными оказались два метода. Метод доплеровской спектроскопии (он же метод лучевых скоростей) – метод основан на том, что планета и звезда врашаются вокруг общего центра масс. Орбитальное вращение звезды приводит к тому, что линии в ее спектре периодически смещаются то в одну, то в другую сторону. Скорость звезды, «наведенная» планетой, оказывается порядка всего нескольких десятков или даже единиц метров в секунду, однако прецизионные спектральные наблюдения позволяют ее обнаружить. Именно методом

доплеровской спектроскопии было открыто большинство экзопланет. Наблюдения транзитов – этот метод основан на том, что при планетной системы «с ребра» планета, с точки зрения земного наблюдателя, может периодически проходить по диску звезды, незначительно (обычно на 1-3%) ослабляя ее блеск. Точные фотометрические наблюдения позволяют построить «крипту блеска» (график зависимости блеска звезды от времени) и найти радиус планеты и период ее вращения по орбите [12]. Очень, много космических аппаратов было задействовано для открытия новых экзопланетных систем. Работа миссии Kepler оказалась очень плодотворной, благодаря одновременным наблюдениям за 200 000 звезд в созвездии Лебедя, которое находится в Млечном Пути. В результате количество вне солнечных планет, открытых методом транзитов резко возросло. На рисунке 2 представлены все возможные методы обнаружения экзопланет, предложенные разными исследователями в разные годы [2].

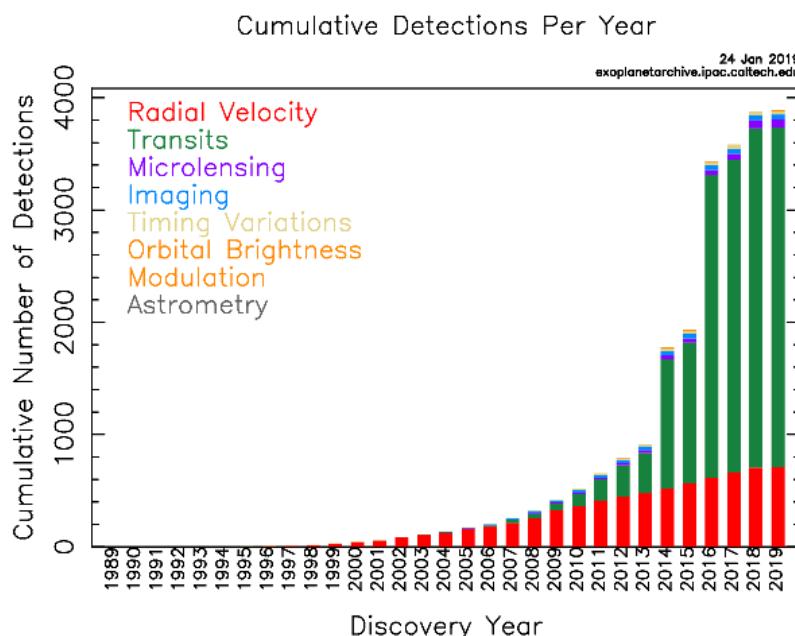


Рисунок 2 – Кумулятивные результаты количества экзопланет, открытых различными методами к началу каждого года

Основные характеристики экзопланетных систем

Известно, что Солнечная система является первой планетной системой свойство которой относительно хорошо изучена. Все экзопланетные системы обладают более или менее подобными свойствами солнечной системы. Большинство экзопланетные системы с центральной звездой обладают одной планетой [2-3].

Сporадическая активность звезды – вспышки и выбросы корональной массы, – оказывает важное влияние на эволюцию атмосфер планет, особенно если планеты на близких орбитах. Поскольку звездная активность возрастает с уменьшением звездного возраста, последствия этих экстремальных явлений для атмосфер планет особенно важны для

Высокие потоки звездного излучения в мягком рентгене и крайнем ультрафиолете (XUV) приводят к нагреву и последующему расширению верхних слоев атмосферы и к образованию надтепловых атомов, которые также могут влиять на энергетический баланс в термосфере планеты. В зависимости от состава атмосферы и эффективности нагрева состояния верхних атмосфер могут меняться от гидростатического к гидродинамическому режимам. Орбиты внесолнечных планет сильно отличаются по величи-

не эксцентриситета и по величине наклонения. Формирования внесолнечных планет впрямую зависит от массы центральной звезды. Выяснилось, что распространенность планет-гигантов быстро растет с увеличением массы звезд. Также оказалось, что планеты у звезд промежуточной массы (1.5-3 массы Солнца) большинстве своем массивны и находятся на широких орбитах с малым эксцентриситетом [11].

Из-за солнечного ветра Солнце и большинство звезд класса G теряют массу со скоростью 10^{-14} массы солнца в год. Нестационарные звезды ранних спектральных классов теряют массу намного больше, например звезды WR теряют массу со скоростью 10^{-5} массы солнца в год. А звезды класса M теряют массу со скоростью 10^{-6} - 10^{-7} массы солнца в год. Такие существенные потери масс центральной звезды сильно влияют на динамическую эволюцию соответствующих экзопланетных систем. Установлена тесная взаимосвязь между эволюционными изменениями родительской звезды и экзопланетной системы. На ранних стадиях эволюции планетных систем родительская звезда находится на Главной Поступательности и протопланетный диск еще сохраняется. В этой стадии акреция вещества протопланетного диска на поверхность родительской звезды может вызывать эпизодические анизотропные выбросы массы – джеты,

которые оказывают влияние на формирование планет, а также могут вызывать их разрушение. В некоторых случаях при многократных сбросах оболочек могут образовываться планеты с разными эксцентриситетами и наклонениями. Джеты, формирующиеся на разных расстояниях от звездного экватора, оказывают влияние на все параметры орбит. Для расчета моделей подобных планетных систем можно принять анизотропный характер процессов потери массы. А вот для формирующихся планет влияние асимметричных долгоживущих джетов может быть значительным. Например, наклон планетной орбиты может измениться на несколько градусов. Нами, по различным каталогам был проведен статистический анализ по количеству подтвержденных экзопланетных систем по спектральным классам их родительских звезд. В качестве систем, похожих на Солнечную, были выбраны системы, чьи планеты движутся по орбитам с малым эксцентриситетом, и не имеющие массивных планет в зоне эффективной земной орбиты [4,8].

Классификация планетных систем по спектральным классам родительских звезд

Оказалось, что большинство известных экзопланет врачаются вокруг звезд спектральных классов F, G, K и M. Наше Солнце относится к классу G. Массы звезд этого класса составляют от 0,8 до 1,7 солнечной массы. Мы обнаружили, что звезды класса G имеют наибольшее количество экзопланетных систем. Мы построили диаграмму по спектральному классу центральных звезд подтвержденных экзопланет по каталогу «The Extrasolar Planets Encyclopaedia» [2].



Рисунок 3 – Распределение экзопланет по спектральным классам центральной звезды

После образования некоторых планет, внутри родительской звезды могут протекать ядерные реакции горения изотопов водорода, гелия, лития и бора, после чего они медленно остывают. Поверхностная температура 1000 -2000К. Этим карликам присвоены спектральные классы L и T [13]. В данное время известны L-1;T-5;WD-2; sdBV-2. Ниже приведено статистический анализ по спектральному классу центральных звезд обнаруженных экзопланет по источнику.

Статистический анализ планетных систем по орбитальным параметрам европейского каталога экзопланетных систем

Экзопланеты по массе делятся на три типа: Планеты – гиганты такие как Юпитер и Сатурн (с массой больше 60 масс Земли или 0,19 масс Юпитера); Нептуны, такие как Уран и Нептун (с массой больше 7 масс Земли); Планеты земного типа такие как Земля и Венера (масса меньше 7 масс Земли). По степени нагрева излучением родительской звезды планеты делятся на 7 типов: горячие $R/R_{\text{эфф}} < 0.1$; очень теплые $0.1 < R/R_{\text{эфф}} < 0.4$; теплые $0.4 < R/R_{\text{эфф}} < 0.8$; холодные $1.3 < R/R_{\text{эфф}} < 3$; очень холодные $3 < R/R_{\text{эфф}} < 12$; ледяные $R/R_{\text{эфф}} > 12$. Здесь R – большая полуось орбиты планеты, $R_{\text{эфф}}$ – радиус эффективной земной орбиты [1].

На рисунке 4 можно отметить различные экзопланеты с разными значениями по температуре центральной звезды и по большой полуоси планеты: HD 149382 b: $a=0.0256$ (AU), $T_{\text{ef.host.s}}=35500$ K; NY Vir (AB) c: $a=7,54$ (AU), $T_{\text{ef.host.s}}=33000$ K; HIP 77900 b: $a=3200$ (AU), $T_{\text{ef.host.s}}=13700$ K; Betta Cir b: $a=6656$ (AU), $T_{\text{ef.host.s}}=8676$ K. На диаграмме самая большая эффективная температура центральной звезды вокруг которой вращается экзопланета под названием NSVS 1425 (AB) d: $a=3.74$ (AU), $T_{\text{ef.host.s}}=42000$ K [2].

По значениям эффективной температуры центральной звезды можно определить к какому классу относится та или иная звезда, вокруг которой вращается экзопланета.

На рисунке 5. показано распределение экзопланет по эксцентриситету и по наклонению. gamma1Leo b: $i=172,1^\circ$, $e=0,144$; VB 10 b: $i=96,9^\circ$, $e=0,98$; HD 131664 b: $i=167,1^\circ$, $e=0,638$; HD 190 228 b: $i=4,5^\circ$, $e=0,5$; WASP-80 b: $i=89,92^\circ$, $e=0,07$. У большинства экзопланет наклонения лежат между 80 и 95 градусов при этом эксцентриситеты могут быть различными. Например, HATS-67 b: $i=79,02^\circ$, $e=0,014$ и HD 80606 b: $i=89,285^\circ$, $e=0,93366$ [2].

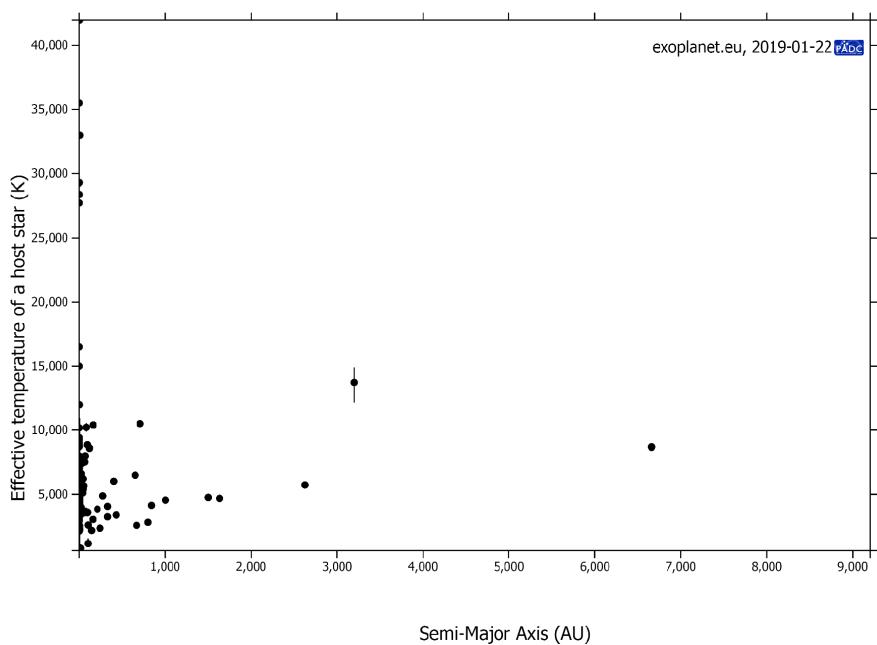


Рисунок 4 – Распределение экзопланет по эффективной температуре центральных звезд и по большой полуоси экзопланет

На рисунке 6. показано распределение экзопланет по аргументуperiцентра и по наклонению. Кappa And b: $i=121^\circ$, $\omega=129,5^\circ$; betta Pic b: $i=88,87^\circ$, $\omega=189,3^\circ$; PSR1257 12 d: $i=47^\circ$, $\omega=108,3^\circ$; Kepler-46 c $i=87,25^\circ$, $\omega=329,4^\circ$. Аргумент пе-

рицентра экзопланет очень различен. Например, самые маленькие значения у экзопланеты WASP-6 b: $i=88,47^\circ$, $\omega=1,7^\circ$ и большие значения аргументаperiцентра у экзопланеты WASP-162 b: $i=89,3^\circ$, $\omega=358,1^\circ$ [2].

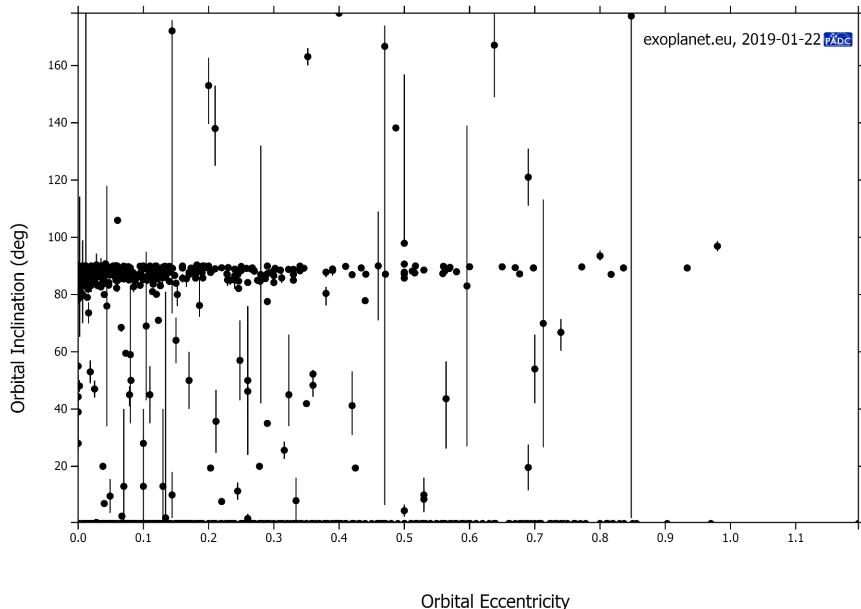


Рисунок 5 – Распределение экзопланет по эксцентриситету и по наклонению

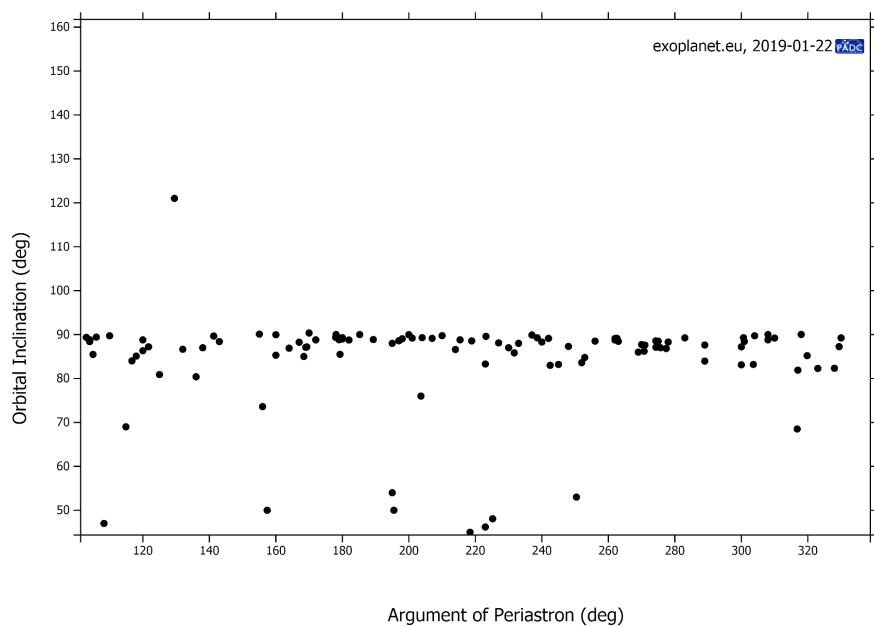


Рисунок 6 – Распределение экзопланет по аргументуperiцентра и по наклонению

Происхождение эксцентрикитетов внесолнечных планет-гигантов может быть вызвано действием различных механизмов: гравитационного взаимодействия между соседними планетами-гигантами, взаимодействия планеты-гиганта с планетезималями на ранних стадиях образования планетной системы, влияния дополнительного звездного или планетного компаньона, и т.п. Последний эффект в ряде случаев кажется наиболее интересным. Средняя скорость некоторых планет с высоким эксцентрикитетом показывает дрейф, соглашающийся с присутствием долгопериодического компаньона. Гравитационное влияние более удаленного компаньона может вызвать наблюдаемый высокий орбитальный эксцентрикитет. Этот эффект был предложен как механизм увеличения эксцентрикитета планеты, вращающейся вокруг звезды 16 Cyg B. Однако, что такой процесс, действуя в одиночку, привел бы к чрезмерному количеству планет как очень высоким ($e>0,6$), так и с очень низким ($e<0,1$) эксцентрикитетом. Таким образом, требуется, по крайней мере, еще один дополнительный механизм для воспроизведения наблюдаемого распределения по эксцентрикитетам. Фактически, ни один из предложенных механизмов возникновения эксцентрикитета не в состоянии в одиночку объяснить наблюдаемое распределение эксцентрикитетов внесолнечных планет [1].

Экзопланеты вокруг двойных систем

Большинство планет обнаруженных у двойных звезд находятся на орбитах «S типа» (вокруг одной компонентной двойной их также называют внутренними планетами) и остальные на орбитах «P типа» (вокруг обеих компонентов; также орбита еще называются внешними или циркумбинарными). По данным [15] известно около 200 экзопланет вокруг двойных звездных систем.



Рисунок 7 – Распределение экзопланет по спектральным классам двойных звезд

Исследования динамической эволюций экзопланетных систем в двойных звездных системах подробно рассматривались в работе Muterspaugh, Matthew W и другие [16]. На рисунке 7 показано количество экзопланет вокруг двойных звезд по спектральным классам.

Заключение

По статистическим данным и нашим исследованиям можно отметить, что по массам больше всего открыто планет типа Юпитера, то есть в интервале от 0 до 3 масс Юпитера.

Существуют определенные условия, чтобы сделать планету пригодной для жизни земного типа, и на эти условия влияют несколько ключевых факторов. Размер и температура звезды, а также орбита планеты во многом определяет состояние жидкой воды на поверхности. Планеты, слишком близкие к звезде, настолько горячие, что любая вода на поверхности кипит, а планеты слишком далеко от звезды настолько холодные, что любая жидккая вода замерзает. Размер и масса планеты определяют, может ли она поддерживать атмосферу [11,14]. Самые горячие звезды имеют температуру до 35 000

К. Звезды с температурой 10 000 К белые, с температурой 6000 К жёлтые в том числе наша Солнце, с температурой 3000–3500 К красные гиганты.

Поэтому, статистический анализ по количеству подтвержденных экзопланетных систем по спектральным классам центральных звезд и статистический анализ по орбитальным элементам является актуальным для дальнейшего исследования динамической эволюции экзопланетных систем.

Используя различные каталоги [2,3,15], был проведен статистический анализ экзопланетных систем около нестационарных родительских звезд разных спектральных классов. Оказалось, что большинство известных экзопланет вращается вокруг звезд спектральных классов F, G, K и M. Массы этих звезд составляют от 0,8 до 1,7 M_{\odot} . Мы обнаружили, что наибольшее количество экзопланетных систем, принадлежат звездам класса G.

Благодарности. Работа поддерживается программой целевого финансирования BR05336383 Аэрокосмического комитета Министерства обороны и аэрокосмической промышленности Республики Казахстан.

Литература

- 1 Udry S, Fischer D, Queloz D., A Decade of Radial-Velocity Discoveries in the Exoplanet Domain // Protostars and Planets. – 2007. – P. 685-699
- 2 <http://exoplanet.eu>
- 3 <http://exoplanetarchive.ipac.caltech.edu>
- 4 Черепашук А.М. Тесные двойные звезды. Часть II. – М.: Физматлит, 2013. – 572 с.
- 5 Фесенков В.Г. Корпускулярная радиация как фактор эволюции Солнца и звёзд. – М.: Изд-во Академии наук СССР, 1952. – 69 с.; Солнце и солнечная система. Избр. труды. – М., 1976. – С. 118-132.
- 6 Омаров Т.Б. Динамика гравитирующих систем метагалактики. – Алма-Ата: Наука. Казахской ССР, 1975. – 144 с.
- 7 Lukyanov L.G., Dynamical evolution of stellar orbits in close binary systems with conservative mass transfer // Astron. Rep. – 2008. – Vol. 52, N 8. – P. 680–693.
- 8 Сурдин В.Г. Рождение звезд. – М.: Эдиториал УРСС, 1999. – 232 с.
- 9 Софонов В.С. Эволюция допланетного облака и образование Земли и планет. – М.: Наука, 1969. – 243 с.
- 10 Veras D., Hadjidemetriou J. and Christopher A. An Exoplanet's Response to Anisotropic Stellar Mass-Loss During Birth and Death // MNRAS. – 2016. – Vol. 435. – P. 2416.
- 11 Luger R., Barnes R., Lopez E. et al. Habitable evaporated cores: Transforming minineptunes into super-earth in the habitable zones of M dwarfs // Astrobiology. – 2015. – Vol.15. – P. 57-88.
- 12 Karttunen H. et al. Exoplanets. In: Karttunen H. et al. (eds), Fundamental Astronomy, – Berlin: Springer, Heidelberg, 2017. – 550 p.
- 13 Терещенко В.М. Экзопланеты: параметры и проблемы // Вестник КазНПУ им. Абая. Сер. физ.-матем. – 2004. – №3 (11). – С.86-98.
- 14 Bonfils X., Astudillo-Defru N., Diaz R., et al. A temperate exo-Earth around a quiet M dwarf at 3.4 parsecs // Astron. & Astrophys. – 2018. – Vol. 613. – A25.
- 15 <http://www.openexoplanetcatalogue.com>
- 16 Muterspaugh, Matthew W., Konacki, Maciej et al. Observational Techniques for Detecting Planets in Binary Systems // Chapter to appear in the book “Planets in Binary Star Systems,” ed. Nader Haghighipour. – Springer publishing company, 2007. – 33 p.

References

- 1 S. Udry, D. Fischer, D. Queloz, *Protostars and Planets*, 685-699 (2007).
- 2 <http://exoplanet.eu>
- 3 <http://exoplanetarchive.ipac.caltech.edu>
- 4 A.M. Cherepashuk. *Close binary stars. Part. II*, (Moscow, Fizmatlit, 2013), 572p. (in Russ)
- 5 V.G. Fesenkov, *Korpuskulyarnaya radiatsiya kak faktor evolyutsii Solntsa i zvozd*, (Moscow, Izd-vo Akademii nauk SSSR, 1952), 69p.; *Solntse i solnechnaya sistema. Izbr. trudy*, (Moscow, 1976), 118-132. (in Russ)
- 6 T.B. Omarov, *Dinamika gravitiruyushchikh sistem metagalaktiki*, (Alma-Ata, Nauka. Kazakhskoy SSR, 1975), 144p. (in Russ)
- 7 L.G. Lukyanov, *Astron. Rep.*, 52, 8, 680–693 (2008).
- 8 V.G. Surdin, *The birth of stars*, (Moscow, Editorial URSS, 1999), 232p. (in Russ)
- 9 V.S. Sofronov, *The evolution of the pre-planetary cloud and the formation of the Earth and planets*, (Moscow, Nauka, 1969), 243p. (in Russ)
- 10 D. Veras, J. Hadjidemetriou, A. Christopher, *MNRAS*, 435, 2416 (2016).
- 11 R. Luger, R. Barnes, E. Lopez et al., *Astrobiology*, 15, 57-88 (2015).
- 12 H. Karttunen et al., *Exoplanets*. In: Karttunen H. et al. (eds), *Fundamental Astronomy*, (Springer, Berlin, Heidelberg, 2017). 550p.
- 13 V.M. Tereshchenko, *Bulletin Abay Kazakh National Pedagogical University. Ser. Phys.-Mat.*, 3 (11), 86-98 (2004). (in Russ)
- 14 X. Bonfils., N. Astudillo-Defru., R. Diaz., et al. *Astron. & Astrophys.*, 613, A25 (2018).
- 15 <http://www.openexoplanetcatalogue.com>
- 16 M.W. Mutterspaugh, M. Konacki et al. *Observational Techniques for Detecting Planets in Binary Systems // Chapter to appear in the book “Planets in Binary Star Systems,”* ed. Nader Haghighipour (Springer publishing company, 2007), 33p.

2-бөлім
ПЛАЗМА ФИЗИКАСЫ

Section 2
PLASMA PHYSICS

Раздел 2
ФИЗИКА ПЛАЗМЫ

МРНТИ 29.27.31; 29.27.47

Исмагамбетова Т.Н.¹, Габдуллин М.Т.^{1,2}

¹НИИЭТФ, Казахский национальный университет им. аль-Фараби,
Казахстан, г. Алматы

²Казахстанско-Британский технический университет,
Казахстан, г. Алматы, e-mail: gabdullin@physics.kz

ПАРНЫЕ КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ФУНКЦИИ ПЛОТНОЙ ВОДОРОДНОЙ ПЛАЗМЫ

Были исследованы структурные свойства плотной неидеальной водородной плазмы. Потенциалы взаимодействия частиц, учитывающие квантово-механические эффекты дифракции и симметрии, были использованы в качестве модели взаимодействия. Электронно-электронные парные корреляционные функции были получены при решении интегрального уравнения Орнштейна-Цернике в гиперцепном приближении на основе потенциалов взаимодействия. Квантово-механический эффект симметрии рассматривался для разных направлений спинов электронов. Эффект симметрии учитывает принцип исключения Паули. Влияние эффекта симметрии как квантово-механического эффекта более выражено на малых расстояниях и в более плотной плазме. Антипараллельное направление электронных спинов увеличивает вероятность нахождения электронов на расстоянии R друг от друга, параллельное направление уменьшает эту вероятность из-за запрета на присутствие двух электронов с одинаковыми спинами в одном и том же состоянии. Результаты данной работы были сравнены с результатами метода классического сопоставления ("classical mapping"). Основная идея классического сопоставления состоит в том, чтобы установить взаимосвязь между квантовой и эталонной классической системами, такую, чтобы структура классической системы была такая же, как у рассматриваемой квантовой системы. Результаты данной работы показывают хорошее согласие с результатами метода классического сопоставления в гиперцепном приближении с мостиковой функцией и компьютерного моделирования.

Ключевые слова: неидеальная плазма, парные корреляционные функции.

Ismagambetova T.N.¹, Gabdullin M.T.^{1,2}

¹IETP, al-Farabi Kazakh National University, Kazakhstan, Almaty
²Kazakh-British Technical University, Kazakhstan, Almaty, e-mail: gabdullin@physics.kz

Pair correlation functions of a dense hydrogen plasma

The structural properties of a dense non-ideal hydrogen plasma were investigated. The interaction potentials of particles, taking into account the quantum-mechanical effects of diffraction and symmetry, were used as an interaction model. The electron-electron pair correlation functions were obtained by solving the Ornstein-Zernike integral equation in the hypernetted-chain approximation based on the interaction potentials. The quantum mechanical symmetry effect was considered for different directions of electron spins. The symmetry effect takes into account the Pauli exclusion principle. The effect of the symmetry effect as a quantum mechanical effect is more pronounced at small distances and in a denser plasma. The antiparallel direction of electron spins increases the probability of finding electrons at a distance R from each other, the parallel direction reduces this probability due to the prohibition of the presence of two electrons with identical spins in the same state. The results of this work were compared with the results of the classical comparison method ("classical mapping"). The main idea of the classical comparison is to establish the relationship between the quantum and reference classical systems, such that the structure of the classical system is the same as that of the quantum system in question. The results of this paper show good agreement with the results of the classical mapping in the hypernetted-chain approximation with the bridge function and computer simulation.

Key words: non-ideal plasma, pair correlation functions.

Исмагамбетова Т.Н.¹, Габдуллин М.Т.^{1,2}¹ЭТФЗИ, өл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті,
Қазақстан, Алматы қ.²Қазақстан-Британ техникалық университеті,
Қазақстан, Алматы қ., e-mail: gabdullin@physics.kz

Тығыз сутекті плазманың жұп корреляциялық функциялары

Тығыз идеал емес сутекті плазманың құрылымдық қасиеттері зерттелді. Дифракция мен симметрияның кванттық-механикалық эффектілерін ескеретін әсерлесу бөлшектердің әсерлесу потенциалдары әсерлесу үлгісі ретінде қолданылды. Электрон-электрон жұп корреляциялық функциялары әсерлесу потенциалдарының негізінде гипперцентты жұықтаудағы Орнштейн-Цернике интегралды тендеуін шешу барысында алынды. Симметрияның кванттық-механикалық эффектісі электрон спиндарының әртүрлі бағыттары үшін қарастырылады. Симметрия эффектісі Паялидің шығарып тастау принципін ескереді. Симметрия эффектісінің кванттық-механикалық эффект ретіндегі әсері жақын қашықтықтарда және тығыз плазмада жақсы көрінеді. Электрон спиндарының параллель емес бағыттары электрондардың бір-бірінен R қашықтықта болу мүмкіндігін үлкейтеді, ал параллель бағыт бұл мүмкіндікті кішірейтеді, себебі бір күйде спиндары бірдей екі электрон болуына тыйым салынған. Берілген жұмыстың нәтижелері классикалық салыстыру әдісінің (“classical mapping”) нәтижелерімен салыстырылған. Классикалық салыстырылған жүйенің құрылымы қарастырылып отырған кванттық жүйенікімен бірдей болатындей байланыс орнату. Берілген жұмыстың нәтижелері көпірлік функциясы бар гипперцентты жұықтаудағы классикалық салыстыру әдісі мен компьютерлік модельдеу нәтижелерімен жақсы үйқастық көрсетеді.

Түйін сөздер: идеал емес плазма, жұптық корреляциялық функция.

1. Введение

В данной работе рассматривается плотная водородная плазма, представляющая значительный интерес как в теоретическом, так и в практическом плане, например, неидеальная плазма, встречающаяся в термоядерных реакторах. В плотной или неидеальной плазме значительную роль играют межчастичные взаимодействия. В такой плазме среднее межчастичное расстояние

имеет один порядок с тепловой длиной волной частиц. В плотной плазме высока вероятность столкновений с таким максимальным сближением, что становится важным учет волновой природы сталкивающихся частиц.

Потенциалы взаимодействия [1-3], используемые в этой статье, учитывают квантово-механические эффекты дифракции и симметрии на малых расстояниях:

$$u_{ab}(r) = \frac{e_a e_b}{r} \left(1 - t h \left(\sqrt{2} \frac{\lambda_{ab}^2}{a_B^2 + br^2} \right) e^{-th\left(\sqrt{2}\frac{\lambda_{ab}^2}{a_B^2+br^2}\right)} \right) \left(1 - e^{-\frac{r}{\lambda_{ab}}} \right) - \delta_{ae} \delta_{be} k_B T \ln \left(1 - \frac{1}{2} e^{-\frac{r^2}{\lambda_{ee}^2}} \right) \quad (1)$$

где $e_a e_b$ – заряд частиц a и b, $\lambda_{ab} = \frac{\hbar}{\sqrt{2\pi m_{ab} k_B T}}$ – тепловая длина волн, де Брооля, $m_{ab} = \frac{m_a m_b}{(m_a + m_b)}$ – приведенная масса, $r_D = \left(\frac{k_B}{4\pi e^2 \sum_j n_j Z_j^2} \right)^{1/2}$ – радиус Дебая, также

безразмерные параметры: $\Gamma = \frac{(Ze)^2}{ak_B T}$ – параметр связи, $r_s = \frac{a}{a_B}$ – параметр плотности, $a = \left(\frac{3}{4\pi n_e} \right)^{1/3}$ – среднее расстояние между электронами, a_B – радиус Бора. Первое слагаемое учитывает эффект дифракции, второе –

эффект симметрии (усредненное направление электронных спинов).

Параметр вырождения для электронной компоненты определяется следующим выражением:

$$\Theta = \frac{k_B T}{E_F} = 2 \left(\frac{4}{9\pi} \right)^{\frac{2}{3}} Z^{\frac{5}{3}} \frac{r_s}{\Gamma}, \quad (2)$$

Где E_F – энергия Ферми электронов, $\Theta >> 1$ – классическая плазма, $\Theta \geq 1$ – слабо вырожденная плазма, $\Theta < 1$ – вырожденная плазма.

Для учета разных направлений спина электрона использовалась следующая формула вместо второго слагаемого в формуле (1):

$$U_{ee,0}^{S(T)}(r) = -k_B T \ln \left(1 \pm \exp \left(-\frac{r^2}{\lambda_{ee}^2} \right) \right), \quad (3)$$

где $S = 1$ соответствует параллельным спинам, $S = 0$ – антипараллельным спинам.

2. Парные корреляционные функции

Парные корреляционные функции $g(r)$ были рассчитаны на основе интегрального уравнения Орнштейна-Цернике [4]:

$$\vec{h}(r) = \vec{C}(r) + n \int \vec{C}(r_3 - r_1) \vec{h}\left(\begin{vmatrix} \vec{r}_3 & \vec{r}_2 \end{vmatrix}\right) dr_3 \quad (4)$$

в гипперцепном приближении (HNC):

$$C_{HNC}(r) = h(r) - \ln g(r) - \frac{u(r)}{k_B T}, \quad (5)$$

где $\vec{h}(r) = \vec{g}(r) - 1$ – полная корреляционная функция, $\vec{C}(r)$ – прямая корреляционная функция, $u(r)$ – потенциал взаимодействия. Уравнения (4) и (5) были рассчитаны численными методами.

На рисунке 1 представлены электрон-электронные потенциалы взаимодействия, полученные в данной работе, в сравнении с [5]. На рисунке 1 показаны графики потенциалов взаимодействия при различных значениях параметра

вырождения $t=0=0$ (черная), 0.1 (красные квадратики), 1 (синие кружочки), 10 (сиреневые квадратики). Синяя ($t=0=1$) и бирюзовая ($t=0=10$) линии – результаты на основе потенциала (1) при усредненном направлении электронных спинов.

На рисунках 2-4 представлены графики электрон-электронные парные корреляционные функции, рассчитанных на основе потенциала (1), в сравнении с работой [6]. На рисунке 2 представлены электрон-электронные парные корреляционные функции при $r_s=1$, $\Gamma=0.5$. Сплошные линии – результаты классического сопоставления (“classical mapping”) в гипперцепном приближении с мостиковой функцией [7-10], полученной в [11] на основе [12-15] (HNCB), точечные линии – результаты квантового моделирования Монте-Карло (QMC). Черные линии – для параллельных спинов, красные линии – для антипараллельных спинов. На рисунке 3 показаны электрон-электронные парные корреляционные функции при $r_s=1$, $\Gamma=0.5$ и $r_s=6$, $\Gamma=3$. Сплошные линии – HNCB, пунктирные линии – HNC [16], точечные линии – QMC [17]. Черные линии – $r_s=1$, красные линии – $r_s=6$. Бирюзовая и сиреневая линии – на основе потенциала (1) при $r_s=1$ и $r_s=6$. На рисунке 4 показаны электрон-электронные парные корреляционные функции при $r_s=1$, $\Gamma=0.07$ и $r_s=6$, $\Gamma=0.4$. Сплошные линии – HNCB, пунктирные линии – HNC, точечные линии – QMC. Черные линии – $r_s=1$, красные линии – $r_s=6$. Зеленая и синяя линии – на основе потенциала (1) при $r_s=1$ и $r_s=6$.

На рисунках 5-6 представлены электрон-электронные парные корреляционные функции, полученные в данной работе, в сравнении с [18].

На рисунке 5 представлены электрон-электронные парные корреляционные функции при $r_s=6$, $t=0=0.5$ (черная линия), 1 (красная линия), 4 (зеленая линия), 8 (сиреневая линия). Сплошными линиями обозначены результаты классического сопоставления в гипперцепном приближении с мостиковой функцией, квадратиками – компьютерного моделирования Монте-Карло (PIMC). На рисунке 6 показаны электрон-электронные парные корреляционные функции при $r_s=6$, $t=0=0.5$ (черная линия), 1 (красная линия), 4 (зеленая линия), 8 (сиреневая линия). Сплошными линиями обозначены результаты классического сопоставления в гипперцепном приближении с мостиковой функцией, кружочками – классического сопоставления (PDW). Сплошная синяя и бирюзовая линии обозначают электрон-

электронные парные корреляционные функции на основе потенциала (1) при $t=0=4$ и 8 .

Эффект симметрии учитывает принцип Паули, который запрещает одновременное присутствие двух одинаковых частиц с полуцелым спином (в данном случае электронов) в одном квантовом состоянии, что уменьшает вероятность нахождения частиц на расстоянии r друг от друга. Влияние эффекта симметрии как кванто-во-механического эффекта более выражено на малых расстояниях и в более плотной плазме.

Результаты данной работы показывают хорошее согласие с результатами метода классического сопоставления (“classical mapping”) в гиперцепном приближении с мостиковой функцией и компьютерного моделирования.

Основная идея классического сопоставления состоит в том, чтобы установить взаимосвязь между квантовой и эталонной классической системами, такую, чтобы структура классической системы была такая же, как у рассматриваемой квантовой системы. С помощью потенциала взаимодействия, учитывающего квантовые эффекты, мы можем решить корреляционные функции эталонной классической системы, используя классические методы многих тел, а именно теории жидких состояний. Этот метод, предложенный Дхарма-Варданой и др. [19], классический метод сопоставления, был успешно применен к различным электронным системам с небольшими вычислительными затратами [20-25].

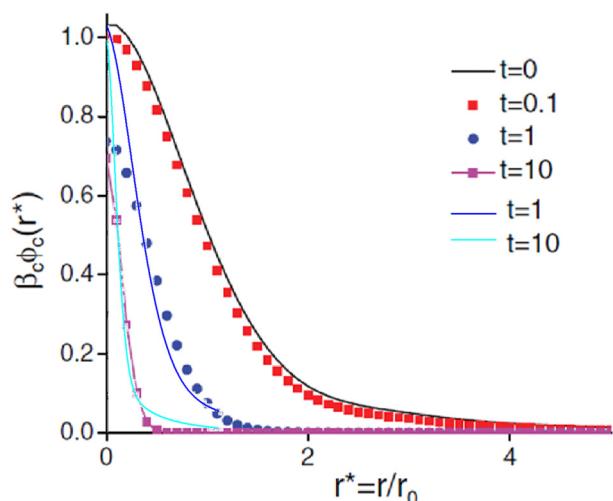


Рисунок 1 – Парный потенциал Паули для $t=0, 0.1, 1, 10$

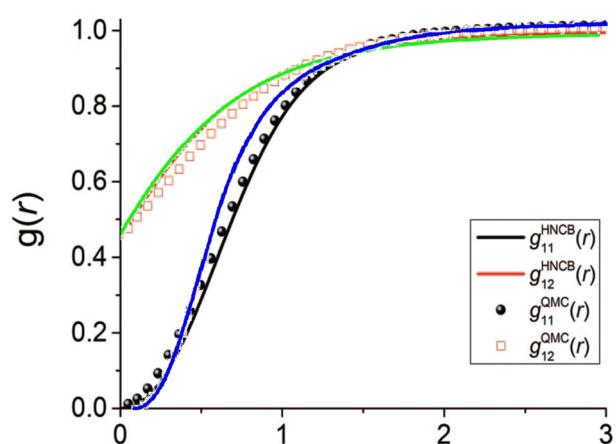


Рисунок 2 – Электрон-электронные парные корреляционные функции при $r_s=1$, $\Gamma=0.5$

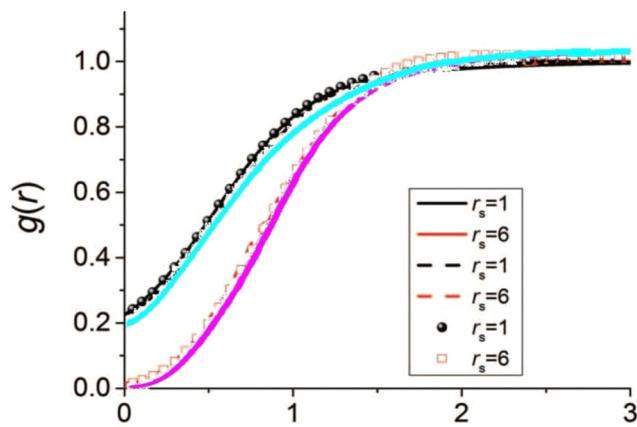


Рисунок 3 – Электрон-электронные парные корреляционные функции при $r_s=1, \Gamma=0.5$ и $r_s=6, \Gamma=3$

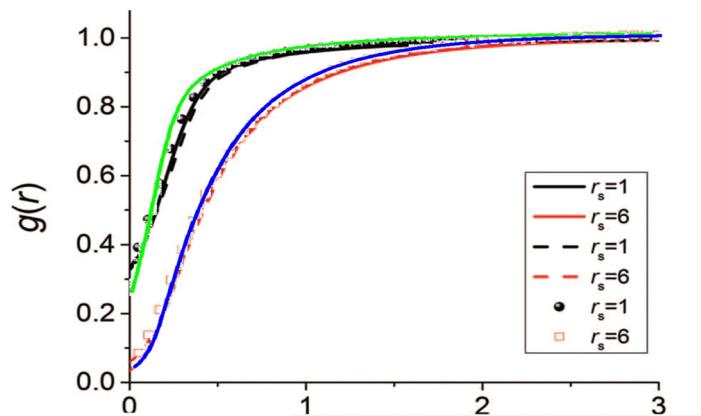


Рисунок 4 – Электрон-электронные парные корреляционные функции при $r_s=1, \Gamma=0.07$ и $r_s=6, \Gamma=0.4$

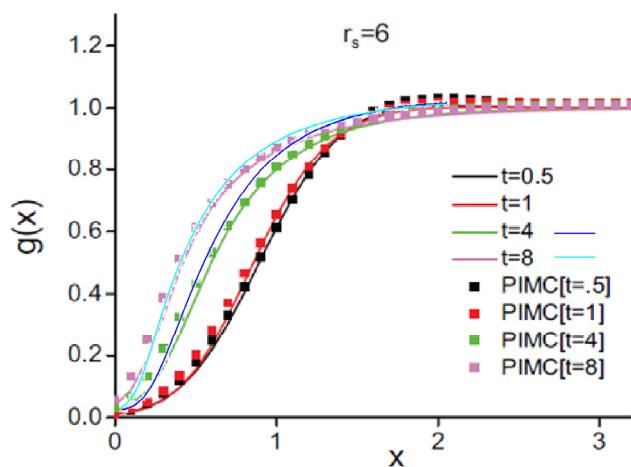


Рисунок 5 – Электрон-электронные парные корреляционные функции при $r_s=6, t=0=0.5, 1, 4, 8$

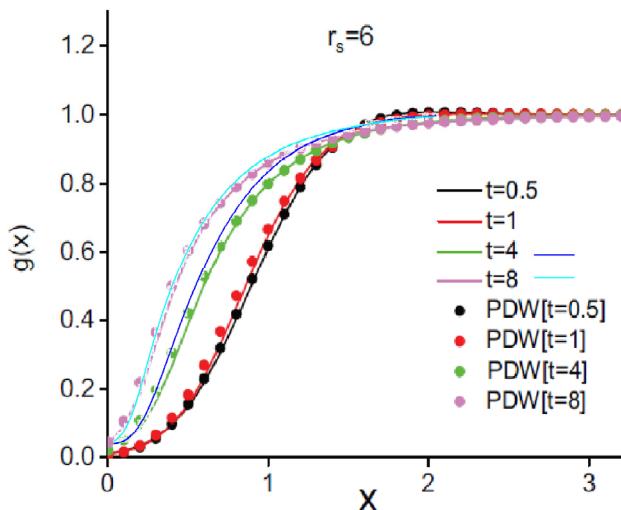


Рисунок 6 – Электрон-электронные парные корреляционные функции при $r_s=6$, $t=0.5, 1, 4, 8$

3. Выводы

Эффект симметрии учитывает принцип исключения Паули. Влияние эффекта симметрии как квантово-механического эффекта более выражено на малых расстояниях и в более плотной плазме. Антипараллельное направление электронных спинов увеличивает вероятность нахождения электронов на расстоянии R друг от

друга, параллельное направление уменьшает эту вероятность из-за запрета на присутствие двух электронов с одинаковыми спинами в одном и том же состоянии.

Эта работа была поддержанна Министерством образования и науки Казахстана по гранту на проект №AP05134366.

Литература

- 1 Moldabekov Zh.A., Ramazanov T.S., Dzhumagulova K.N. Pair Interaction Potential of Particles for Two-Component Plasma // Contrib. Plasma Phys. – 2012. – Vol. 52. – P. 207-210.
- 2 Ramazanov T.S., Moldabekov Zh.A., Gabdullin M.T., and Ismagambetova T.N. Interaction potentials and thermodynamic properties of two component semiclassical plasma // Phys. Plasmas. – 2014. – Vol. 21. – P. 012706.
- 3 Gabdullin M.T., Ramazanov T.S., Muratov M.M., Ismagambetova T.N., Akhtanova G.B., and Goree J.A. Structural Characteristics and Equation of State of the Complex Plasmas // Contrib. Plasma Phys. – 2015. – Vol. 55 (5). – P. 366-372.
- 4 Goodstein D.L. States of Matter. – Dover publications, Inc., 2002. – 512 p.
- 5 Dutta S., and Dufty J. Classical representation of a quantum system at equilibrium: Theory // Phys. Rev. E. – 2013. – Vol. 87. – P. 032101.
- 6 Liu Y., and Wu J. A bridge-functional-based classical mapping method for predicting the correlation functions of uniform electron gases at finite temperature // The Journal of Chemical Physics. – 2014. – Vol. 140. – P. 084103.
- 7 Du Q. H., Beglov D., and Roux B. Solvation Free Energy of Polar and Nonpolar Molecules in Water: An Extended Interaction Site Integral Equation Theory in Three Dimensions // J. Phys. Chem. B. – 2000. – Vol. 104. – P. 796-805.
- 8 Ballone P., Pastore G., Galli G., and Gazzillo D. Additive and non-additive hard sphere mixtures // Mol. Phys. – 1986. – Vol. 59. – P. 275-290.
- 9 Duh D. M. and Henderson D. Integral equation theory for Lennard-Jones fluids: The bridge function and applications to pure fluids and mixtures // J. Chem. Phys. – 1996. – Vol. 104. – P. 6742.
- 10 Kovalenko A. and Hirata F. Hydration free energy of hydrophobic solutes studied by a reference interaction site model with a repulsive bridge correction and a thermodynamic perturbation method // J. Chem. Phys. – 2000. – Vol. 113. – P. 2793.
- 11 Zhao S., Feng P., and Wu J. A liquid-state theory for electron correlation functions and thermodynamics // Chem. Phys. Lett. – 2013. – Vol. 556. – P. 336-340.
- 12 Rosenfeld Y. Free-Energy Model for the Inhomogeneous Hard-Sphere Fluid Mixture and Density-Functional Theory of Freezing // Phys. Rev. Lett. – 1989. – Vol. 63. – P. 980.
- 13 Kierlik E. and Rosinberg M. L. Density-functional theory for inhomogeneous fluids: Adsorption of binary mixtures // Phys. Rev. A. – 1991. – Vol. 44. – P. 5025.
- 14 Lowen H. Melting, freezing and colloidal suspensions // Phys. Rep.-Rev. Sec. Phys. Lett. – 1994. – Vol. 237. – P. 249-324.

- 15 Yu Y.X. and Wu J.Z. Structures of hard-sphere fluids from a modified fundamental-measure theory // *J. Chem. Phys.* – 2002. – Vol. 117. – P. 10156.
- 16 Dutta S. and Dufty J. Uniform electron gas at warm, dense matter conditions // *Europhys. Lett.* – 2013. – Vol. 102. – P. 67005.
- 17 Brown E.W., Clark B.K., DuBois J.L., and Ceperley D.M. Path-Integral Monte Carlo Simulation of the Warm Dense Homogeneous Electron Gas // *Phys. Rev. Lett.* – 2013. – Vol. 110. – P. 146405.
- 18 Dutta S., and Dufty J. Classical representation of a quantum system at equilibrium: Applications // *Phys. Rev. E* – 2013. – Vol. 87. – P. 032102.
- 19 Dharma-Wardana M. W. C., and Perrot F. A simple classical mapping of the spin-polarized quantum electron gas: distribution functions and local field corrections // *Phys. Rev. Lett.* – 2000. – Vol. 84. – P. 959.
- 20 Dharma-Wardana M.W.C. Spin and temperature dependent study of exchange and correlation in thick two-dimensional electron layers // *Phys. Rev. B*. – 2005. – Vol. 72. – P. 125339.
- 21 Dharma-Wardana M.W.C., Perrot F. Structure of the local-field factor of the 2D electron fluid. Possible evidence for correlated scattering of electron pairs // *Europhys. Lett.* – 2003. – Vol. 63. – P. 660.
- 22 Dharma-Wardana M.W.C., Murillo M.S. Pair-distribution functions of two-temperature two-mass systems: Comparison of molecular dynamics, classical-map hypernetted chain, quantum Monte Carlo, and Kohn-Sham calculations for dense hydrogen // *Phys. Rev. E*. – 2008. – Vol. 77. – P. 026401.
- 23 Dharma-Wardana M.W.C., Perrot F. Equation of state and the Hugoniot of laser shock-compressed deuterium // *Phys. Rev. B*. – 2002. – Vol. 66. – P. 14110.
- 24 Dharma-Wardana M. W. C. The classical-map hyper-netted-chain (CHNC) method and associated novel density-functional techniques for warm dense matter// *Int. J. Quantum Chem.* – 2012. – Vol. 112. – P. 53.
- 25 Perrot F. and Dharma-Wardana M. W. C. Spin-polarized electron liquid at arbitrary temperatures: Exchange-correlation energies, electron-distribution functions, and the static response functions // *Phys. Rev. B*. – 2000. – Vol. 62. – P. 16536.

References

- 1 Zh.A. Moldabekov, T.S. Ramazanov, K.N. Dzhumagulova, *Contrib. Plasma Phys.* 52, 207-210 (2012).
- 2 T.S. Ramazanov, Zh.A. Moldabekov, M.T. Gabdullin, and T.N. Ismagambetova, *Phys. Plasmas* 21, 012706 (2014).
- 3 M.T. Gabdullin, T.S. Ramazanov, M.M. Muratov, T.N. Ismagambetova, G.B. Akhtanova, and J.A. Goree, *Contrib. Plasma Phys.* 55 (5), 366-372 (2015).
- 4 D.L. Goodstein *States of Matter* (Dover publications, Inc., 2002), 512 p.
- 5 S. Dutta, and J. Dufty, *Phys. Rev. E* 87, 032101 (2013).
- 6 Y. Liu, and J. Wu, *The Journal of Chemical Physics* 140, 084103 (2014).
- 7 Q. H. Du, D. Beglov, and B. Roux, *J. Phys. Chem. B* 104, 796 (2000).
- 8 P. Ballone, G. Pastore, G. Galli, and D. Gazzillo, *Mol. Phys.* 59, 275 (1986).
- 9 D. M. Duh and D. Henderson, *J. Chem. Phys.* 104, 6742 (1996).
- 10 A. Kovalenko and F. Hirata, *J. Chem. Phys.* 113, 2793 (2000).
- 11 S. Zhao, P. Feng, and J. Wu, *Chem. Phys. Lett.* 556, 336 (2013).
- 12 Y. Rosenfeld, *Phys. Rev. Lett.* 63, 980 (1989).
- 13 E. Kierlik and M. L. Rosinberg, *Phys. Rev. A* 44, 5025 (1991).
- 14 H. Lowen, *Phys. Rep.-Rev. Sec. Phys. Lett.* 237, 249 (1994).
- 15 Y.X. Yu and J.Z. Wu, *J. Chem. Phys.* 117, 10156 (2002).
- 16 S. Dutta and J. Dufty, *Europhys. Lett.* 102, 67005 (2013).
- 17 E. W. Brown, B. K. Clark, J. L. DuBois, and D. M. Ceperley, *Phys. Rev. Lett.* 110, 146405 (2013).
- 18 S. Dutta, and J. Dufty, *Phys. Rev. E* 87, 032102 (2013).
- 19 M. W. C. Dharma-Wardana, and F. Perrot, *Phys. Rev. Lett.* 84, 959 (2000).
- 20 M.W.C. Dharma-wardana, *Phys. Rev. B* 72, 125339 (2005).
- 21 M.W.C. Dharma-wardana, F. Perrot, *Europhys. Lett.* 63, 660 (2003).
- 22 M.W.C. Dharma-wardana, M.S. Murillo, *Phys. Rev. E* 77, 026401 (2008).
- 23 M.W.C. Dharma-wardana, F. Perrot, *Phys. Rev. B* 66, 14110 (2002).
- 24 M. W. C. Dharma-Wardana, *Int. J. Quantum Chem.* 112, 53 (2012).
- 25 Perrot F. and Dharma-Wardana M. W. C., *Phys. Rev. B*. 62, 16536 (2000).

3-бөлім

**КОНДЕНСИРЛЕНГЕН КҮЙ ФИЗИКАСЫ
ЖӘНЕ МАТЕРИАЛТАНУ ПРОБЛЕМАЛАРЫ.
НАНОФЫЛЫМ**

Section 3

**CONDENSED MATTER PHYSICS AND
MATERIALS SCIENCE PROBLEMS.
NANOSCIENCE**

Раздел 3

**ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ
И ПРОБЛЕМЫ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ.
НАНОНАУКА**

FTAMP 29.19.16; 81.09.03

Агишанова Н.Ж., Мұрадов А.Д., Алджамбекова Г.Т.

әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті,
Қазақстан, Алматы қ., е-mail: naz-1596@mail.ru

**ЭЛЕКТРОНМЕН СӘУЛЕЛЕНДІРУДІҢ ЖӘНЕ
КҮМІСПЕН ҚАПТАУ ПРОЦЕСТЕРИНІҢ
ПОЛИИМИДТІ ҰЛДІРЛЕРДІҢ ДЕФОРМАЦИЯЛАНУЫНА ӘСЕРІ**

Полиимидті үлбірлердің механикалық деформациялануына электронмен сәулелендіру және күміспен қаптау процестерінің әсері зерттелді. Полиимидті негіздің құрылымына ерітінді сінірлігеннің металдық қабат қалындығы 1 үм-ден 5 үм-ды құрады. Күміс айнасының көрінетін және инфрақызыл аймағына қатысты бетті қаптауы 80÷97 %-ды құрады. ЭЛУ-6 сызықтық үдемтішінде электрон шоғырының орташа энергиясы 2 MeV, интегралды токта 1000 μ A-ге дейінгі импульстердің жиберу жиілігі 200 Hz мен импульс ұзақтығы 5 μ s болатын гамма сәулелену жүргізілді. Үлгілердің жұтылу дозасы: 10, 20, 30 және 40 MGy-ды құрады. Үлгілердің деформациясын бірөсті созылу режимінде Instron 5982 универсалды сынау машинасымен бөлме температурасында жүргізілді. Берілген физикалық факторлардың әсерінен композитті материалдардың құрылымдық өзгерістері аудада DRON-2M типтес рентгендік дифрактометрінде CuK α 293 K температурасында сәулеленумен ($\lambda_{\alpha\text{Cu}}=1,5418 \text{ \AA}$) зерттелді.

Таза үлбірге қарағанда үлбірлердің металдау нәтижесінде беріктік шегінің $\Delta\sigma = 105 \text{ MPa}$ және пластикалығының $\Delta\varepsilon = 75\%$ айтарлықтай өсуі белгіленді. Бұл өсу металдандырылған үлбірлердің құрылымының өзгеру ерекшеліктеріне және олардың химиялық өндегіштіктеріне шарттарына байланысты. Металдандырылған полиимидтің үлбірлердің электронды сәулеленуі оның серпімділік және беріктілік көрсеткіштерін тәмемделетеді. Мөлшері өскен сайын концентрациясы артатын және полиимидтің макромолекула түйіндерінің үзіліс түрінде болатын материалдардың реттелген құрылымының бұзылуымен және қапталған күмістің жаңа фазаларының пайда болуымен түғызылатын күміс тотығы түрінде болатын қаптаудағы жаңа фазалардың пайда болуымен байланысты болып келеді.

Түйін сөздер: полиимид, композитті материалдар, күміспен металдау, механикалық деформация, серпімділік модулі, Юнг модулі, электронды сәулелену, математикалық модель.

Agishanova N.Zh., Muradov A.D., Aldzhambekova G.T.
Al-Farabi Kazakh National university,
Kazakhstan, Almaty, e-mail: naz-1596@mail.ru

**Influence of silver metallization and electron irradiation on the processes
of mechanical deformation of polyimide films**

The effect of silver metallization and electron irradiation on the physical and mechanical properties of polyimide films is studied. The metal layer of the polyimide base impregnated into the structure was from 1 to 5 μm thick. The coatings on the surface contained 80÷97 % of the relative silver mirror in the visible and infrared regions. The irradiation was carried out on a linear accelerator ELU-6 with an average electron beam energy of 2 MeV, an integral current of up to 1000 μA with a pulse frequency of 200 Hz and a pulse duration of 5 μs . The absorbed dose by the samples was: 10, 20, 30 and 40 MGy. Deformation of the samples was performed at room temperature in the uniaxial tension mode on the universal testing machine Instron 5982. Study of structural changes in composite materials in the result of the impact of these physical factors was studied in the x-ray diffractometer type DRON-2M in air at 293 K, CuK α radiation ($\lambda_{\alpha\text{Cu}}=1.5418 \text{ \AA}$).

A significant increase in the mechanical characteristics as a result of metallization of films compared to the pure film, so the increase in the tensile strength by $\Delta\sigma=105$ MPa and plasticity by $\Delta\varepsilon=75\%$, which is associated with the peculiarities of changes in the structure of metallized films and the conditions of their chemical etching. Electronic irradiation of the metallized polyimide film worsens its elastic and strength parameters, which is caused by the formation of new phases in the coating in the form of silver oxide, the concentration of which increases with increasing dose, and is also caused by a violation of the ordered structure of the material in the form of a rupture of the macromolecules of polyimide and the formation of new phases of silver in the coating. The mathematical model, which is in good agreement with the experimental data and allows to predict the elastic properties of silver metallized polyimide films, is obtained.

Key words: polyimide, composite materials, silver metallization, mechanical deformation, modulus of elasticity, young's modulus, electron irradiation, mathematical model.

Агишанова Н.Ж., Мурадов А.Д., Алджамбекова Г.Т.

Казахский национальный университет им. аль-Фараби,
Казахстан, г. Алматы, e-mail: naz-1596@mail.ru

Влияние металлизации серебром и электронного облучения на процессы деформации полимерных пленок

Исследовано влияние металлизации серебром и электронного облучения на физико-механические свойства полимерных пленок. Металлический слой импрегнированного в структуру полимерной основы имел толщину от 1 до 5 μm . Покрытия на поверхности содержали 80÷97% относительного серебряного зеркала в видимой и инфракрасной областях. Облучение производилось на линейном ускорителе ЭЛУ-6 со средней энергией пучка электронов 2 MeV, интегральном токе до 1000 μA с частотой посылки импульсов 200 Hz и продолжительностью импульсов 5 μs . Поглощенные дозы образцами составляли: 10, 20, 30 и 40 MGy. Деформацию образцов производили при комнатной температуре в режиме одноосного растяжения на универсальной испытательной машине Instron 5982. Структурные изменения в композитных материалах в результате воздействия данных физических факторов изучались на рентгеновском дифрактометре типа ДРОН-2М на воздухе при температуре 293 K, CuK α излучением ($\lambda_{\alpha\text{Cu}}=1,5418$ Å).

Установлено значительное повышение механических характеристик в результате металлизации пленок по сравнению с чистой пленкой. Так увеличение предела прочности на $\Delta\sigma=105$ MPa и пластичности на $\Delta\varepsilon=75\%$, которое связано с особенностями изменения структуры металлизированных пленок и условиями их химического травления. Электронное облучение металлизированной полимерной пленки ухудшает ее упругие и прочностные показатели, что вызвано образованием новых фаз в покрытии в виде окиси серебра, концентрация которых возрастает с увеличением дозы, а также вызвано нарушением упорядоченной структуры материала в виде разрыва звеньев макромолекул полимера и образованием новых фаз серебра в покрытии. Получена математическая модель, которая хорошо согласовывается с экспериментальными данными и позволяет прогнозировать упругие свойства металлизированных серебром полимерных пленок.

Ключевые слова: полимер, композитные материалы, металлизация серебром, механическая деформация, модуль упругости, модуль Юнга, электронное облучение, математическая модель.

Kіріспе

Металданырылған полимерлі материалдардың қасиеттерін алу мен зерттеу қажеттілігі олардың космостық саласында, электроникада және де кең қолданыстағы тауарларды шығару үшін кең ауқымда қолдануымен байланысты. Жаңа материалдарды тандаудағы негізгі бағыттар әр түрлі металдау фазаларының механикалық сипаттамаларын сақтай отыра қалындықтары бойынша композитті үлбірлерді алу үшін бағытталған [1-5]. Металданырылған полимер-

лі материалдардың ең перспективтісі- жоғары термотұрақтылыққа, диэлектрлік сипаттамаларға және азғантай ұлғаю коэффициентке иеполимер болып табылады [6-8].

Бұндай тәжірибелдердегі басты сұраққа металданырылған қаптау түрінің өсерің, оның күрылымын және полимерлі композитті материалдардың механикалық қасиеттеріне қаптау сипаттамасын анықтау жатады. Екінші жағынан басты болып механикалық жүктеменің нақты түрін сипаттау үшін тұтқырлы серпімді орталардың анықтаушы тендеулерін алу болып

саналады, ол материалдың әр түрлі механикалық (статикалық, динамикалық және т.б.) әсер етулерде эксплуатациялық сипаттамаларын болжауды қамтамасыз етеді [9-14].

Сондыктан тұтқыр серпімділерді, металданырылған полимерлі материалдардың беріктілікте және басқа да механикалық сипаттамаларды зерттеу, олардың механикалық тәртібіне қаптау құрылымының әсерін анықтау, олардың тәртібін болжау әдістерін өндөу қазіргі кезде өзекті және маңызды іс болып табылады [15-22].

Қазіргі жұмыстың маңаты күміспен металдау мен электронды сәулелену мөлшерінің полииимидті үлдірдің механикалық деформация процестеріне әсерін анықтау.

Зерттеу әдістемесі

Металданырылған полииимидті үлдірлерді зерттеу 2 кезеңде жүргізілді: бірінші кезеңі металданырылған үлдірлердің үлгілерін алу ретінде қарастырылды, ал екінші кезеңі осы үлгілердің механикалық қасиеттерінің өзгеруін үйрену және осы процестің механизмін көрсеттін математикалық моделін құрастырылуы қарастырылды.

Бірінші кезең екі сатыдан құралады. Технологиялық тізбектің бірінші сатысы әр түрлі қалындықтарғы АБ-имид лагы негізіндегі полииимидті үлдірлерді алушы қамтиды. Технологиялық сыйбасы 90 °C-та келесі кептіруі бар және 1 мен 2 сағат 180 °C-та аралығында үлдірдің орамға оралуына сәйкес термиялық циклизациясы таспалы транспортердің когезиялық қабатына фильтрлер арқылы лактың итеріліп шығатынын болжады.

Екінші кезеңі органикалық еріткіште, суль-спиртті сілтілі ерітіндісінде, тазалау, қайта қалпына келуші металмен хелатирлеу, диализден тазалау және 220 °C-та металдың термохимиялық қалпына келуі бастапқы полииимидті үлдірлердің тізбектеп өндөу негізінде орамды металданырылған үлдірлерді алу болып саналады.

Металданырылған полииимидті үлдірлер ерітінді сінірлгенниң полииимидті негіз құрылымына тұтас (бір немесе екіжакты) металдық қабат түрінде жасалды. Металдық фазасы қалындығы 1-ден 5 μm-ге дейінгі болатын күміс арқылы орындалды. Конструкция үлгілерінің суммарлы қалындығы бастапқы үлдір қалындығына сәйкес 25-100 μm құрады. Металданырылған қаптаулар күміс айнасына қатысты

көрінетін және инфрақызыл аймағында бетте 80÷97 % құрады. Металданырылған полииимидті үлдірлердің алынған орамдарынан ені 5 mm және жұмыстық ұзындығы 50 mm болатын үлгілер кесілді, содан соң үлгілер әр түрлі дозада электрондармен сәулелендіру мақсатында 5 топқа бөлінді. Үлгілердің бір тобы бақылау ретінде қолданылып сәулеленуге ұшырамады.

Үлгілерді сәулелендіру сзықты ЭЛУ- 6 күштейткішінде жүргізілді. Электрон шоғының орташа энергиясы импульстерді жіберу жиілігі 200 Hz мен импульс ұзақтығы 5 μs болатын интегралды токта 1000 μA-ге дейін 2 MeV құрады. Әр топтың үлгілермен жұтылу дозасы (D)- 10, 20, 30 және 40 МГр құрады.

Кейін үлгілер универсалды Instron 5982 сынау машинасында бірөсті созу режимінде бөлме температурасында деформацияланды. Механикалық сынаулардың жүргізілу методологиясы универсалды Instron 5982 сынау машинасын қолдануға негізделді.

Эксперименттік нәтижелер және оның талқылаулары

Кейбір металдарда оксидтердің болуымен амидқышқылды фрагменттері катализатордың жоқтығына қарағанда өте жоғары жылдамдықпен имидизацияланады, бір уақытта алынған жүйелердің тұтқырылғы біршама көтеріледі. Күйдіруден кейін циклденбеген имидті топтардың саны төмендейді, ал полииимидті үлдірлердің термиялық тұрықтылығы жоғарылайды.

Металдық қабаты металдық бөлшектерді формалау нәтижесінде жасалынды: басында Ag иондары үлдірлердің бетінде кішкене кристалдарды туғызады, олар диффузияланушы кеуекті каналдардың жүйесі негізіндегі қайта қалпына келуші күмістің иондарының әсерінен өседі. Беттің морфологиясы – наноқұрылымдық және беттік қабаттың көлеміне қарай біртекті емес болып келеді. Нәтижесінде сыртқы қабаты тығыз қапталған металдың өлшемі 50 nm-ге жуық дәнін көрсетеді. Дәндері беттік қабатта 8-10 nm-ге ие және полииимидтің матрицалық негіздері арасында аралышықтармен бөлінген. Металдың сыртқы қабатында максимал металға ие болатын үлдірлер көлемі бойынша қатаң тасымалдаушы градиенті бар және ол материалдың тереңдігі бойынша азаймалы болып табылады (1-сурет а, б, в).



а – жоғарғы қабат, б – ішкі қабаты, в – кесілген кездегі үлбір

1-сурет – Күмістелген полиимидті үлбірлердің жоғарғы металдық қабатының СЭМ суреттері

Металдық беттік қабатының қабатталуы (деламинация) барлық полимерлі қабаттың тұстасығы 160 МПа (бөлме температурасында) мен 100 МПа (200°C-тан жоғары) дейінгі кернеуде бұзылмайынша бақыланбайды.

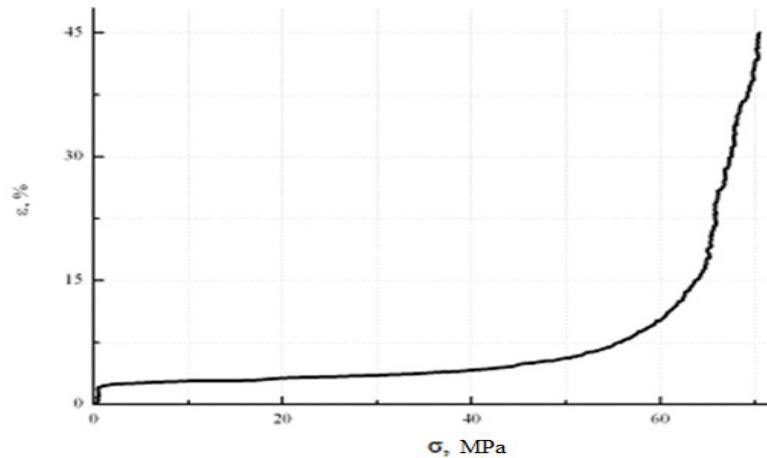
Алғашқыда таза полиимидті үлбірдің бір-өсті созылу кезіндегі салыстырмалы ұзарудың сыртқы механикалық кернеуге тәуелділігінің оның ажырауына дейінгі зерттеу арқылы механикалық қасиеттері зерттелген.

2-суретте көрсетілгендей бірінші кезеңде кернеу 0-1МПа аралығында болды және ұзарудың 3%-ға дейін көтерілуі бақыланды. Бұл құбылыш заттардың макромолекулалары кернеу әрекеті бағытымен жылдам тұзуленеді. Берілген кернеулердің 1-ден 40 МПа-ға дейін оның созылуының серпімділігін көрсетуші, Гук заны орындалатын материалдың салыстырмалы сыйықты өсуі байқалады. Берілген аймақта талшық тәріздес полимерлі матрицаның ағысы бағытымен макромолекулалар-

дың созуы орындалады [23-25]. Макромолекулаларда ($-C=O$) жанама байланыстардың үзілуйіне сәйкес үлгіде еріксіз эластикалылығы дамиды.

$\sigma = (40 \div 50)$ МПа аралығында үлгінің ұзаруы бейсызықтық зандылығымен жүргізіледі. Алайда, оның серпімді қасиеттері сақталады, бірақ Гук заны орындалмайды. Кейінгі кернеудің өсуі ($\sigma \geq 50$ МПа) үлгінің пластикалық ағысына әкеледі. Соңғысы ұзарудың экспоненциалды өсуімен алынып, үлгінің үзілуйімен аяқталады. Осы кезде полимерде бензол сақиналарының арасында байланыстардың үзілуйі болады және ол өздігінен деструктивтенеді.

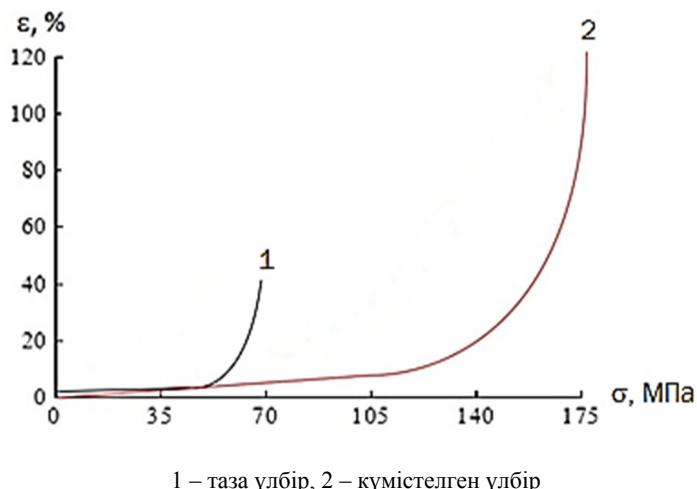
Күміспен металданырылған полиимидті үлбірлердің бір-өсті созылу кезіндегі механикалық қасиеттеріне әсері таза сәулеленбеген және металданырылғандар ушін салыстырмалы ұзарудың (ε) түсірілген кернеуден (σ) тәуелділігі 3-суретте көрсетілген.



2-сурет – Бір-өсті созылу кезіндегі таза полиимидті үлбірдің салыстырмалы ұзаруы

Суретте көрсетілгендей, үлбірдің металдандырылуы оның пластикалық қасиеттерін арттырады, салыстырмалы ұзаруы 120%-ға дейін жетеді, сондай-ақ беріктілік шегін арттырады, түсірілген үзілүү кернеуі~175 МПа-ға жетеді. Металданбаған үлбірмен салыстырғанда металдандырылған үлбірде салыстырмалы ұза-

руы~90 %-га, ал беріктілік шегі~135 МПа-ға артады. Ескере кету керек, зерттелетін үлбірдің үзілүү орнында полиимидтің өзі көрінеді, ал күміс қабатымен қапталғандары оның аймағында қалады. Біздің жағдайымызда үлбірлердің күміспен металдандырылуы металдың химиялық өндөу әдісімен жүргізілді.



3-сурет – Бірөсті созылу кезіндегі сәулеленбеген полиимидті үлбірлердің күміспен металдауда механикалық қасиеттеріне әсепі

Полиимидті үлбірлердің металдануы оның механикалық көрсеткіштерін айтартылтай дәрежеде жақсартады: беріктілігі ~175 МПа-ға жетеді, ал салыстырмалы ұзілүү ұзаруы 120%-ға дейін артады. Бұл параметрлердің есімі таза үлбірлермен салыстырғанда $\Delta\sigma=105$ МПа және $\Delta\varepsilon=75\%-ды$ құрайды.

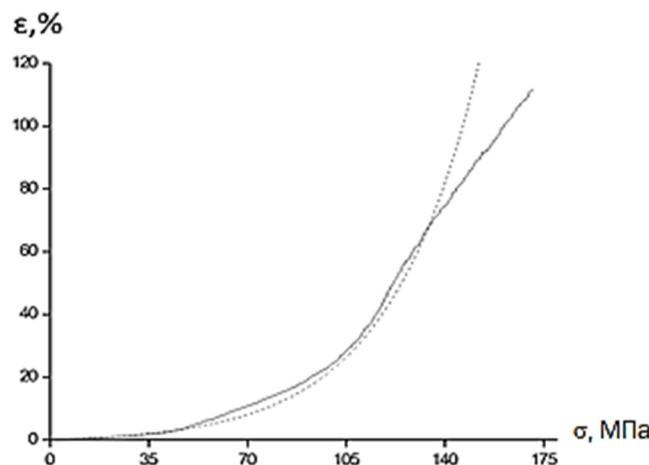
Осындаи металдандырылған материалдардың механикалық көрсеткіштерінің өзгерістері осы үлбірлерді алу әдісі – күмісті химиялық өндөу әдісіне байланысты.

4-суретте көрсетілгендей, металдандырылған үлгілерде (2 қисық) сызықты емес заны бойынша серпімді ұзаруы кернеу интервалында $\sigma=(50\div140)$ МПа бақыланады. Улгінің пластикалық ағысы $\sigma\geq140$ МПа кернеу кезінде туғызылады. Ол ұзарудың экспоненциалды өсуімен беріледі және матрицаның бензолды сақиналарының арасындағы байланыстарында пайдалы болатын бұзылулар секілді оның үзілуймен аяқталады. Осы процесстің барлығы полимерлі

материалдың деструкциясымен бір уақытта және металдың қаптаулардың дәндери арасында байланыстардың үзілуймен беріледі.

Алынған эксперименталдық анықтамалар негізінде серпімді аймағында сәулеленбеген күміспен металдандырылған полиимидті үлбірлер үшін серпімділіктің орташа модуль мәні анықталды, ол 31,7 МПа-ға тең.

Зерттеу қорытындысы бойынша, гамма сәулеленудің әр түрлі дозаларының күміспен металдандырылған полиимидті үлбірлердің беріктілік модуліне әсепі 1-кестеде көрсетілген. Кесте бойынша күміспен металдандырылған полиимидті үлбірлердің электронды сәулеленуінің дозалары артқан сайын, серпімді және беріктілік көрсеткіші төмендергендіктен, оның беріктілік модуль көрсеткіші де азаяды. Күміспен металдандырылған полиимидті үлбірлердің электронды сәулеленудің арналы дозаларының әсепі секілді механикалық көрсеткіштерінің эксперименталды тәуелділіктері 4-суретте көрсетілген.



4-сурет – Сәулеленбеген күміспен металдандырылған полиимидті үлбірлердің біресті созылу кезіндегі салыстырмалы ұзарудың өзгеруі

1-кесте – Күміспен металдандырылған полиимидті үлбірлердің серпімділік модулінің (E) электронды сәулелену дозасынан (D) өзгерісі

Сәулелену дозасы (D), МГр	Беріктілік модулі (E), МПа
10	31,1
20	31,0
30	30,1
40	27,0

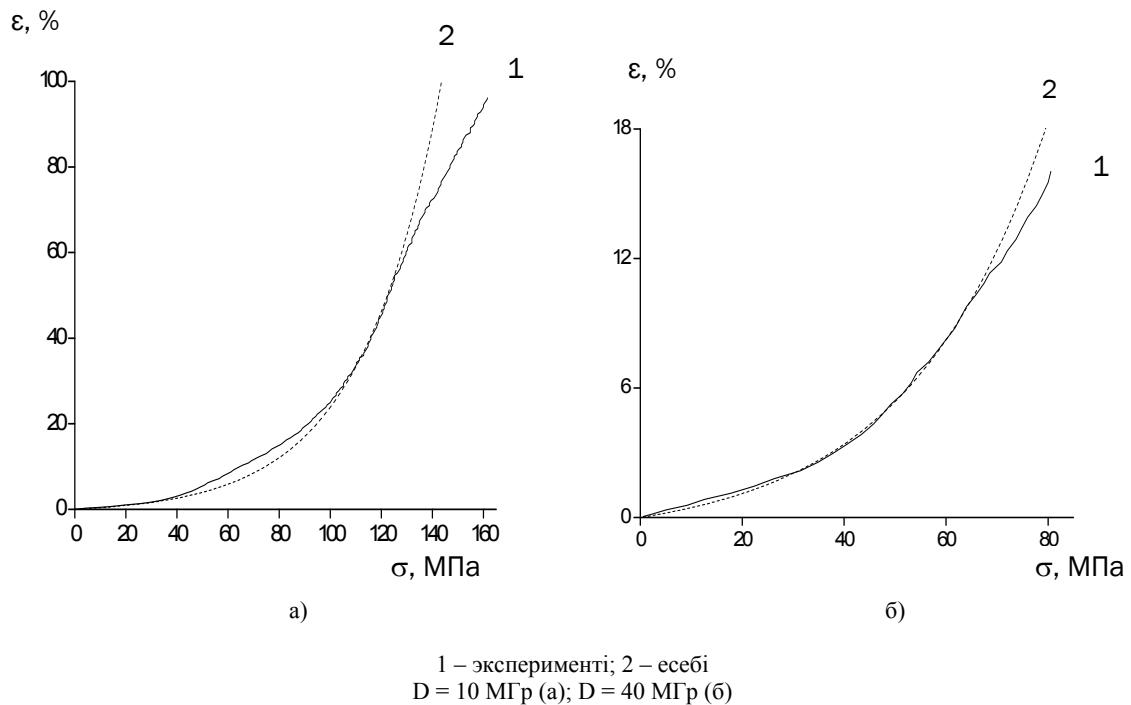
5-суретте (а, б) көрсетілгендегі 4-суреттегі аналогты берілген көрсеткіштермен салыстыра отыра, электронды сәулеленудің күміспен металдандырылған полиимидті үлбірлердің механикалық қасиеттеріне әсері теріс әсерін береді. Сәулелену дозасы есken сайын күміспен металдандырылған полиимидті үлбірлердің механикалық көрсеткіштері елеулі өзгеріске ұшырайды. Дозаның 10-нан 40 МГр-ге артқандықтан материалдың беріктілігі 160-тан 80 МПа-ге дейін төмендеді, яғни 2-есеге, ал максималды салыстырмалы ұзілу ұзаруы ~100 % -дан ~18%-ға дейін төмендеді, яғни 5 есеге дейін төмендеді.

Сәулеленген күміспен металдандырылған полиимидті үлбірлердің механикалық көрсеткіштерінің өзгерістерінің сипаттамасы бойынша берілген математикалық модельнің қолданылуы 5-суретте (а, б) қосымша кисық сзықтармен көрсетілген. Математикалық модель толық түрде серпімді аймақтағы процесстер тәуелділіктерін және сзықты түрде қалай болса, сы-

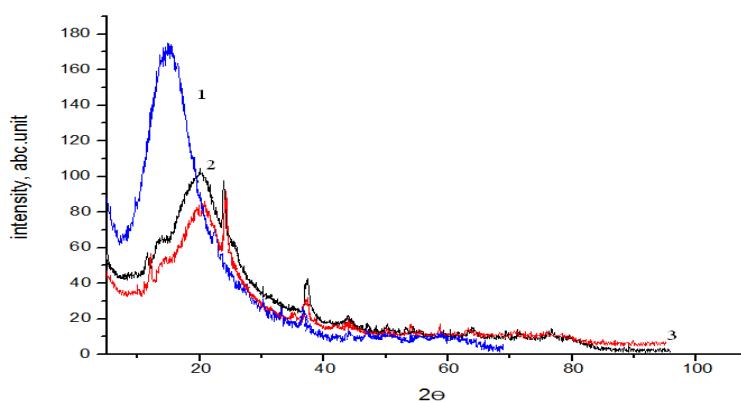
зықты емес қисық аймағындағыдай электрондармен сәулеленген материалдар үшін анықтайды. Бірақ модель таза полиимидті үлбірлер үшін салыстырмалы салыстырмалы ұзарудың кенет өзгерісін сипаттай алмайды, механикалық кернеуі $\sigma = (0 \div 1)$ МПа.

6-суретте күміспен металдандырылған полиимидті үлбірлі материалдардың механикалық деформацияға дейін және үзілуден кейінгі ұшыраган рентгенограммалары көрсетілген, сондай-ак электронды сәулелену дозасы үзілуден кейінгі біресті созылу әсерінен 40 МГр болады. Біресті созылу мен үзілу нәтижесінде сәулеленбеген үлбірлер үшін үзілмеген үлбірлермен (1 қисық) салыстырғанда бірінші максимум интенсивтілігі (~16° кезінде) ~78°-қа азаяды, жылжумен ~6°-қа қарай (2-қисық) өседі. Сәулеленген үлбірдің 40 МГр доза арқылы үзілумен бірге біресті деформация үзілмеген үлбірмен салыстырғанда тұра сондай жылжумен (3-қисық) берілген максимумның 20° қосымша интенсивтілікten төмендеуін туғызады.

1-қисықтың бірінші максимумы алғашқы материалдың жақсы реттелген құрылымы болғанын көрсетеді. Интенсивтіліктің төмендеуі және пиктің бұрыштардың (2 және 3-қисық) өсуіне қарай жылжуы материалдарда құрылымның тәртіптілігі бұзылады және полиимидтің макромолекуларының үзілуі жүреді. Бұл өзгерістер комптондық шашырау нәтижесінде рентгендік сәулеленуде үлбірлердің жаңа шашырау центріне спектр үлкен бұрыштарына ($\theta > 70^\circ$) жылжиды.



5-сурет – Күміспен металдандырылған полиимидті үлбірлердің бірөсті созылу кезінде салыстырмалы ұзаруының электронды сәулелену дозасына байланысты өзгерісі



6-сурет – Механикалық деформацияға ұшыраган, күміспен металдандырылған полиимидті үлбірлі материалдардың рентгенограммалары

$\theta=25^\circ$ мен $\theta=37^\circ$ кезінде қосымша пиктердің туыгдауы мен күшеюі метадық қаптауларда осы әсер етулердің нәтижесінде диэлектрикалық қасиеттері бар күміс тотығы тәріздес жаңа фазалар пайда болды. Оы пиктердің күшеюі металдандырылған үлбірлердің электронды сәу-

леленуі сәулелену дозасымен артатын жаңа фазалардың өсуін туғызады.

Статикалық кернеулер әсерінің (үзілу кернеуінен 80%) температуралық зерттеулері сәулеленбеген үлбір үзілген температура салыстырмалы үзілу ұзаруы $\sim 90\%$ кезінде 290°C курады, ал кернеудің басынан үзілуіне дейінгі уақыты

24 минут аралығын көрсетті. Сәулеленудің дозасы 20 МГр-ге артуымен үзілу болған температурасы 230°C -ты құрады. Сәулелену дозасының 40 МГр-ге дейінгі өсуі үзілу температурасының 95°C -ке төмендегенін көрсетеді, ал уақыты кернеудің бастауынан үзілүне дейін 8 минутты, яғни кернеудің әсер ету уақытының материалдың үзілуі басталғанға дейін 3 есеге дейін қыскарған. Осының бәрі электронды сәулеленумен композитті материалда құрылымдық өзгерістердің туындауымен байланысты, олар оның термомеханикалық көрсеткіштерінің төмендеуіне әкеледі.

Қорытынды

1. Таза үлбірмен салыстырғанда күміспен қаптаулған полиимидті үлбірлердің механикалық көрсеткіштері жақсартылады, беріктілік шегі $\Delta\sigma=105$ МПа мен пластикалығы $\Delta\varepsilon=75\%$ -ге дейін өсуін туғызады. Бұл өзгерістер металдандырылған үлбірлердің құрылым ерекшеліктеріне және оның химиялық өндеу шарттарына байланысты.

2. Күміспен металдандырылған полиимидті үлбірлердің электронды сәулеленуі оның серпімді және беріктілік көрсеткіштерін төмендетеді. Күміс тотығы тәріздес жаңа фазалардың пайда болуымен туғызылатын серпімділік модулі дозаның өсуімен төмендейді, концентрациясы дозаның өсуімен артады.

3. Электронды сәулелену нәтижесінде күміспен қаптаулған полиимидті үлбірлердің механикалық көрсеткіштерінің төмендеуі полиимидтің макромолекулаларының буындарының үзілуі түрінде реттелген құрылымның бұзылуымен жіне қаптаудағы күмістің жаңа фазаларының пайда болуымен туындалды.

4. Берілген математикалық модель серпімді аймақта сәулеленбеген үшін қалай болса әр түрлі дозада электрондармен сәулеленген эксперименталды анықтамалармен жақсы келіседі. Берілген модельдің көмегімен сәулеленбегендегі мен электрондармен сәулеленген күміспен металдандырылған полиимидті үлбірлердің серпімді қасиеттерін болжаяуға болады.

Әдебиеттер

- 1 Кербер М.Л., Виноградов В.М., Головкин Г.С. и др. Полимерные композиционные материалы: структура, свойства, технология. – СПб.: Профессия, 2008. – 560 с.
- 2 Ермаков С.Н., Кербер М.Л., Кравченко Т.П. Химическая модификация и смешение полимеров при реакционной экструзии // Пластические массы. – 2007. – № 10. – С. 32-40.
- 3 Краузе С.В. В сб. Полимерные смеси. Под ред. Поля Д. и Ньюмена С.М. –М.: Мир, 2002. – С. 126-145.
- 4 Griepentrog, M. Comparison of nanoindentation and AFM methods for the determination of mechanical properties of polymers / M. Griepentrog, G. Krämer, B. Cappella // Polymer Testing. –2013. – V.32. –№.3. –P.455-460.
- 5 Nishira T., Nishijima S., Okada T. Creep behavior of an epoxy resin and an epoxy- Based FRP in condition of simultaneous supply of radiation and stress at cryogenic temperatures // JAERI-Conf.- 2015, № 95-020. – С. 55-61.
- 6 Charlesby A. Kinetics of the g-Radiation-Induced single Crystals of Polyethylene Terephthalate) // Nature. – 2013. – Vol. 171, № 4343. – P. 167.
- 7 Little K. ESR Study of Free Radicals Formed by γ -Irradiation of Polyethylene Terephthalate) // Nature. 2015. Vol. 170, № 4338. Р. 1075.
- 8 Михайлин Ю.А. Термоустойчивые полимеры и полимерные материалы. – СПб.: Профессия, 2006. – 623 с.
- 9 Светличный В.М., Курдяевцев В.В. Полиимида и проблема создания современных конструкционных композитных материалов // Высокомолек. соед. 2003. – Серия Б. – Т. 45. №6. – С. 984-1036.
- 10 Gaurav Mago, Dilhan M. Kalyon, Frank T. Fisher. Polymer Crystallization and Precipitation-Induced Wrapping of Carbon Nanofibers with PBT // Journal of Applied Polymer Science. 2015. V. 114. P.1312-1319.
- 11 Elyashevich G.K., Kuryndin I.S., Lavrentyev V.K., Bobrovsky A.Yu., Bukošek V. Porous structure, permeability, and mechanical properties of polyolefin microporous films // Physics of the Solid State. 2017, V. 54. Issue 9, P. 1907–1916.
- 12 Mandelkern L. Crystallization of Polymers. – Cambridge Academ. 2013. 478p.
- 13 Mandelkern L. Crystallization of Polymers: V. 2, Kinetics and Mechanisms – Cambridge University Press. 2013. 478 p.
- 14 Крутько Э.Т. и др. под общ. ред. Прокопчука Н.Р. Полиимида. Синтез, свойства, применение. – Минск: БГТУ, 2002. 303 с.
- 15 Кабанов В.Я., Курдяевцев В.Н. Модифицирование полимеров путем радиационной прививочной полимеризации (современное состояние, тенденция развития). // Химия высоких энергий. 2003. – Т. 37. № 1. – С. 3 -7.
- 16 Шевченко А.А. Физикохимия и механика композиционных материалов. – СПб.: Профессия, 2010. – 224 с.
- 17 Купчишин А.И., Рябых С.М., Нуркеева З.С., Таипова Б.Г., Тронин Б.А., Омарбекова Ж.А. Экспериментальные исследования физико-механических свойств полиимидных пленок // Труды Международной конференции «Физико-химические процессы в неорганических материалах (ФХП-9)». Кемерово, 2004. – Т. 1. – С.580-583.

- 18 Kochnev A.M., Zaikin A.E., Galibeev C.S., Arhireev V.P. Fizikoхимия полимеров. – Казань: Изд-во «Фэн», 2003. – 512c.
- 19 James E. Mark, Harry R. Allcock, Robert West. Inorganic Polymers. – Oxford University Press, 2015. – 360 p.
- 20 Кулезнев В.Н., Шершнев В.А. Химия и физика полимеров. – М.: Колос С, 2007. 367c.
- 21 Крыжановский В.К., Бурлов В.В. и др. Технические свойства полимерных материалов. – СПб.: Профессия, 2005. – 248 c.
- 22 Khan, M.A. High Performance Ferroelectric Memory Based on Phase: Separated Films of Polymer Blends / M.A.Khan, U.S. Bhansali, M.N. Almadhoun, I.N. Odeh, D.Cha, H.N. Alshareef // Advanced Functional Materials. –2014. –V.24. –№.10. – P.1372-1381.
- 23 Tanaki T., Hozoyama K., Hara K. Растворимые свойства фильма полииамида при криогенных температурах и воздействиях радиации на полииамид. Достижения в криогенных технических инженериях, Издания 42, 1996. – С. 21-27
- 24 Нарендры Л., Маткахари В., Бхорескер С. Поверхностные и структурные изменения в полииамиде, облученном электронами с энергией 6 MeV // Материаловедение и разработка: Том 168, Выпуски 1-3, 2010. – С. 122-126
- 25 Umbetova K., Kravtsova V., Korobova N., and Iskakov R. // Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Elektron. – 2016. – Vol. 21. – P.201.

References

- 1 M.L. Kerber, B.M. Vinogradov, G.S. Golovkin i dr. Polimernye kompozicionnye materialy: structura, svoistva, tehnologiya (SPb.: Professiya, 2008), 560. (in Russ)
- 2 S.N. Ermakov, M.L. Kerber, T.P. Kravchenko, Plasticheskie massy, 10, 32 – 40 (2007). (in Russ)
- 3 S.V. Krauze V sb. Polimernye smesi. Pod red. Pola D. i S.M. N'iumena, (Moscow, Mir, 2002), 126-145. (in Russ)
- 4 M. Griepentrog, Polymer Testing, 32 (3), 455-460 (2013).
- 5 T. Nishira, S. Nishijima, and Okada T., JAERI-Conf., 95-020, 55-61 (2015).
- 6 A. Charlesby, Nature, 171 (4343), 167 (2013).
- 7 K. Little, Nature, 170 (4338), 1075 (2015).
- 8 U.A. Mihailin, Termoustoichivye polimernye materialy, (SPb.: Professiya, 2006), 623. (in Russ)
- 9 V.M. Svetlichnyi, and V.V. Kudryavcev, Vysokomolek. soed. B45, 6, 984-1036 (2003).
- 10 M. Gaurav, M. Kalyon Dilhan, and T.Frank, Journal of Applied Polymer Science, 114, 1312-1319 (2015).
- 11 G.K. Elyashevich, I.S. Kuryndin, V.K. Lavrentyev, A.Yu. Bobrovsky, and V. Bukošek, Physics of the Solid State, 54(9), 1907–1916 (2017).
- 12 L. Mandelkern Crystallization of Polymers, (Cambridge Academ., 2013), 478.
- 13 L. Mandelkern Crystallization of Polymers: V.2, Kinetics and Mechanisms, (Cambridge University Press, 2013), 478.
- 14 E.T. Krut'ko i dr. pod obsh. red. Prokopchuka N.R. Poliimidy. Sintez, svoistva, primenenie, (Minsk: BGTU, 2002), 303. (in Russ)
- 15 V.Ya. Kabanov, V.N. Kudryavcev, Himiya vysokih energii, 37(1), 3 -7 (2003). (in Russ)
- 16 A.A. Shevchenko, Fizikohimiya i mehanika kompozicionnyh materialov, (SPb.: Professiya, 2010), 224. (in Russ)
- 17 A.I. Kupchishin, S.M. Ryabyh, Z.S. Nurkeeva, B.G. Taipova, B.A. Tronin, Zh.A. Omarbekova, Trudy Mezhdunarodnoi konferencii «Fiziko- himicheskie processy v neorganicheskikh materialah (FHP-9)». Kemerevo, 1, 580-583 (2004). (in Russ)
- 18 A.M. Kochnev, A.E. Zaikin, S.S. Galibeev, V.P. Arhireev Fizikohimiya polimerov, (Kazan': Izd-vo «Fen», 2003), 512. (in Russ)
- 19 James E. Mark, Harry R. Allcock, Robert West, Inorganic Polymers, (Oxford University Press, 2015), 360.
- 20 V.N. Kuleznev, V.A. Shershnev, Himiya i fizika polimerov, (Moscow, Kolos, 2007), 367. (in Russ)
- 21 V.K. Kryzhanovskii, V.V. Burlov i dr. Tehnicheskie svoistva polimernyh materialov, (SPb.: Professiya, 2005), 248. (in Russ)
- 22 M.A. Khan, U.S. Bhansali, M.N. Almadhoun, I.N. Odeh, D. Cha, H.N. Alshareef, Advanced Functional Materials, 24(10), 1372-1381 (2014).
- 23 T. Tanaki, K. Hozoyama, K. Hara, Dostizheniya v kriogennyh tehnicheskikh inzheneriyah, (Izdaniya 42, 1996), 21-27. (in Russ)
- 24 L. Narendry, V. Matkahari, S. Bhoresker, Materialovedenie i razrabotka, 168 (1-3), 122-126 (2010). (in Russ)
- 25 K. Umbetova, V. Kravtsova, N. Korobova, and R. Iskakov, Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved., Elektron. 21, 201 (2016).

**Shongalova A.^{1,2}, Muratov D.^{1,2}, Rakhmetov B.^{1,2},
Aimaganbetov K.^{1,2}, Zhantuarov S.^{1,2}**

¹Institute of Physic and Technology LLP, Kazakhstan, Almaty

²Satbayev University, Kazakhstan, Almaty

e-mail: sh.a.k90@mail.ru

ON THERMAL STABILITY OF ANTIMONY THIN FILMS FOR SOLAR CELLS APPLICATIONS

Antimony has received considerable attention due to structural archetype for a variety of sulfide and sulfosalt minerals. In this work Sb thin films with thickness of ~ 300 – 400 nm were grown by radio frequency magnetron sputtering, in order to use as a precursor to synthesize chalcogenide semiconductors for solar cells applications. It was shown the influence of annealing temperatures to the structure of the as-deposited Sb films. Antimony thin films were deposited on a glass substrate and subsequently were annealed at different temperatures 300°C, 400°C, 500°C in argon gas ambient. Structural characterization of the films analyzed by Raman scattering spectroscopy, two different excitation wavelengths were used: 532, 632.8 nm. Raman bands both the symmetric (A_{1g}) and nonsymmetrical (E_g) phonons were identified. Transmittance measurements and morphology studies of the films showed stability of annealed films at temperatures at 400 °C and the results of Raman spectroscopy showed their high polycrystalline structure.

Key words: antimony thin films, RF magnetron sputtering, RTP, Raman spectra.

*Шонғалова А.^{1,2}, Мұратов Д.^{1,2}, Рахметов Б.^{1,2},
Аймағанбетов К.^{1,2}, Жантуаров С.^{1,2}

¹Физика-техникалық институт ЖШС, Қазақстан, Алматы қ.

²Сәтбаев университеті, Қазақстан, Алматы қ.
e-mail: sh.a.k90@mail.ru

Күн әлеметтерінде қолдану үшін жұқа антимониум қабықшаларының жылу тұрақтылығы

Сурьма (Sb) әртүрлі сульфид және сульфотталған минералдарға құрылымдық архетиптердің арқасында үлкен көніл бөлінді. Бұл жұмыста қалындығы 300-400 нм болатын жұқа Sb қабыршақтары радиоқиілік магнетронды шашырау өдісімен өсіп, оларды кальцогенидті жартылай өткізгіштерді өндіру және оларды күн батареялары саласында қолдану үшін прекурсор ретінде пайдалану мақсатында жасалды. Тұндырылған Sb қабықшаларының құрылымына жаңу температурасының әсері көрсетілген. Sb жұқа пленкалары шыны субстраттарға қойылып, аргон ортасында әртүрлі температурада: 300 °C, 400 °C, 500 °C қыздыруға ұшырады. Қабықшалардың құрылымдық сипаттамасы Раман спектроскопиясын пайдалана отырып, екі түрлі толқын ұзындығы 532, 632,8 нм пайдаланып талданды. Екі симметриялы (A_{1g}) және ассиметриялы (E_g) фонондардың арасында шашырақты белдестері анықталды. Тасымалдау спектрі мен морфологиялық зерттеулерді өлшеу 400 °C температура кезінде пленкалардың тұрақтылығын көрсетті және Раман спектроскопиясының нәтижелері олардың жоғары поликристалды құрылымын көрсетті.

Түйін сөздер: сурьма жұқа қабыршақтары, магнетронды шашырау, тез пісетін пеш, комбинациялық ыдырау спектрі.

Шонгалова А.^{1,2}, Муратов Д.^{1,2}, Рахметов Б.^{1,2},
Аймаганбетов К.^{1,2}, Жантуаров С.^{1,2}

¹ТОО Физико-технический институт, Казахстан, г. Алматы

²Сатпаев университет, Казахстан, г. Алматы

e-mail: sh.a.k90@mail.ru

Термическая устойчивость тонких пленок антимонии для применения в солнечных элементах

Сурьма (Sb) получила значительное внимание из-за структурного архетипа для различных сульфидных и сульфосольтовых минералов. В этой работе тонкие пленки Sb толщиной ~ 300–400 нм выращивались методом радиочастотного магнетронного распыления с целью использования их в качестве прекурсора для получения халькогенидных полупроводников и их применения в области солнечных элементов. Было показано влияние температур отжига на структуру осажденных пленок Sb. Тонкие пленки Sb были осаждены на стеклянные подложки и в дальнейшем подвергены отжигу при различных температурах: 300 °C, 400 °C, 500 °C в аргоновой среде. Структурную характеристику пленок проанализировали с помощью спектроскопии комбинационного рассеяния света, при использовании двух разных длин волн возбуждения: 532, 632,8 нм. Были идентифицированы полосы комбинационного рассеяния как симметричных (A_{1g}), так и несимметричных (E_g) фононов. Измерения спектров пропускания и морфологические исследования пленок показали стабильность отожженных пленок при температурах 400 °C, а результаты спектроскопии комбинационного рассеяния показали их высокую поликристаллическую структуру.

Ключевые слова: тонкие пленки сурьмы, магнетронное распыление, печь быстрого отжига, спектры комбинационного рассеяния.

Introduction

Thin film solar cells (SC) based on CIGS (copper indium gallium selenide), CdTe (cadmium telluride) have been extensively studied due to their semiconducting properties and they were always cheaper than first generation SC due to technology of producing. CIGS and CdTe has reached solar cells achieving certified solar energy conversion efficiencies of 20.81 and 20.4%, respectively. However, researches on photovoltaic area are aimed at reducing the cost, which include raw material and the manufacturing process. The scarcity of In and Ga in CIGS and high toxicity of Cd in CdTe made research to search for alternative materials. As an alternative material in last decades high interest is caused by such compounds based on Sb such as antimony selenide Sb_2Se_3 , stibnite Sb_2S_3 , copper antimony sulfide $CuSb_xS_y$, antimony telluride Sb_2Te_3 . Among the listed structures Sb_2Se_3 appears to be a promising candidate for photovoltaic because of the following advantageous features: Sb_2Se_3 has an ideal low-band-gap value (1.2–1.0 eV) and a high optical absorption coefficient (around 10^5 cm^{-1} near the absorption onset) [1, 2], which permits a strong visible–near-infrared sunlight absorption. The constituent elements of Sb and Se in Sb_2Se_3 are relatively earth-abundant, inexpensive, and low-toxic. Antimony can be grown on different

substrates. For example antimony forms an abrupt interface with III-V semiconductors such as InP or GaAs [3] without chemical reactions. Also, on the Si [111] substrate films were polycrystalline and displayed a preferential orientation about the (111) axis in a direction perpendicular to the film plane of the substrate [4]. Also, there are several studies on changes in structure characteristics with growth pressure [5, 6]. Like other semi-metals of the group V-A, antimony crystallizes at ambient conditions in the trigonal A7 structure (space group $R\bar{3}m$, No. 166) [7].

One of the most important discoveries in the field of solid-state physics and chemistry is that the properties of a body depend directly on the microstructure, i.e. from the chemical composition, the bounding nature (atomic structure), and body dimensions in one, two or three directions. Other words, if one of the set of parameters changes, then the properties of the body also changes. In this work we analyzed the influence of the annealing temperatures to the structure of the Sb films using Raman scattering spectroscopy.

Experimental methods

Antimony thin films were deposited by radio frequency magnetron sputtering technique from Sb target onto the glass maintained at room temperature

at sputtering pressure 5×10^{-3} mbar. The Sb target was made by powdering of the bulk material and then annealing of the powder at about 700 °C in furnace for rapid thermal processing (RTP). Sputtered thin films (thickness of ~500-600 nm) were annealed at different temperatures in the RTP furnace at 300 °C, 400 °C, 500 °C in Ar ambient (300 sccm) during 10 minutes at maximum temperatures. The morphology of the films were studied on SEM (JEOL). Transmittance spectra of antimony films were measured on the QEX10 Quantum Efficiency/Spectral Response (SR) with a measurement range of 190-1100 nm. The Raman spectroscopy (RS) measurements were done using Solver Spectrum. The RS were analyzed by a single-stage spectrograph with a multichannel CCD detector and excited with the 532 nm line of an Ar-ion laser and with the 632.8 nm HeNe *laser*. The surface of the specimen was focused with the help of 100× objective with a laser spot diameter of ~1 µm when an HeNe laser line (632.8 nm) is used as excitation source and ~0.72 µm when an HeNe laser line (632.8 nm).

Results and discussion

Morphology and transmittance studies. The morphology of antimony films annealed at different temperatures from 300 °C to 500 °C is shown in figure 1 a, b. The surface of the specimens annealed at 300 °C and 400 °C are smooth and no visual changes after annealing, their thickness remained in its original form, which demonstrates the stability of the films at about 400 °C. Also, the stability of the antimony thin films confirmed by transmittance spectroscopy. The results of transmittance measurements are illustrated in figure 2. The transmittance spectra of the as-deposited and annealed films at 300°C and 400°C can be divided into two parts, from 300 nm to 400 nm and from 400 nm to 1100 nm. In part 300-400 nm spectra films has highly transparency. From 400 nm absorbance of the annealed films goes up because of a higher orderliness of the crystal structure. In case of film obtained at 500 °C became almost transparency (fig.2), there is remains of antimony on top of glass can be observed (fig.1 c).

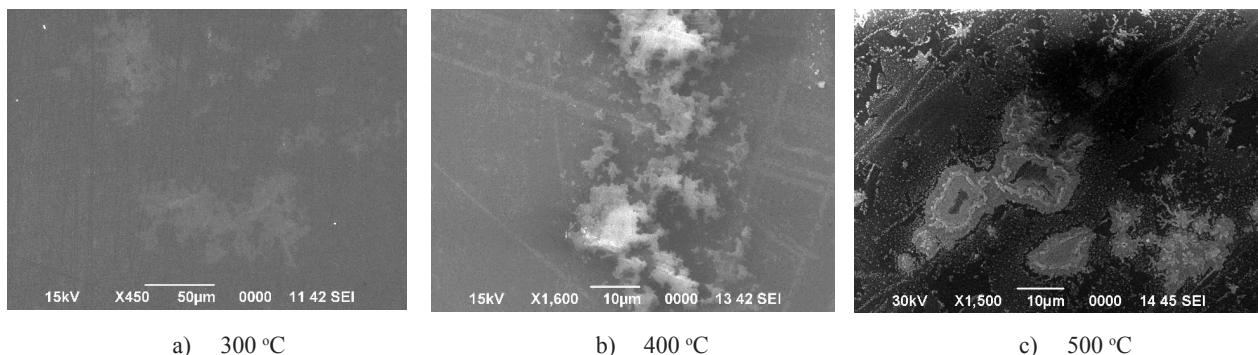


Figure 1 – SEM of antimony films prepared at different annealing temperature

Structure analysis. The A7 structure of Sb-I is trigonal, with six atoms per hexagonal unit cell occupying the 6c position (fig.3). Changes in a condition of growth lead to lattice distortions. The structure is rhombohedral distortion of simple cubic structure, which forms layers of atoms arranged along the hexagonal axis. Two distortion modes lead from the parent cubic-primitive (cP1) to the A7 (hR2) structure: a rhombohedra elongation along a cubic [111] direction and a pairing of the original cubic (111) lattice planes. Atoms in red mark opposite corners of the distorted cube. According to

the group-theory there are two Raman active modes for the A7 structure at ambient-pressure: A_{1g} mode at 150 cm^{-1} and a two-fold degenerated E_g mode at 115 cm^{-1} .

Our thin films were investigated with two different excitation wavelengths: 532 nm, 632.8 nm. RS from 50 to 350 cm^{-1} under different excitation wavelengths. The laser power for each laser wavelength are the same 50 mW, integration time were kept at 60s for both red and green laser lines. All spectra were measured through a 100X objective.

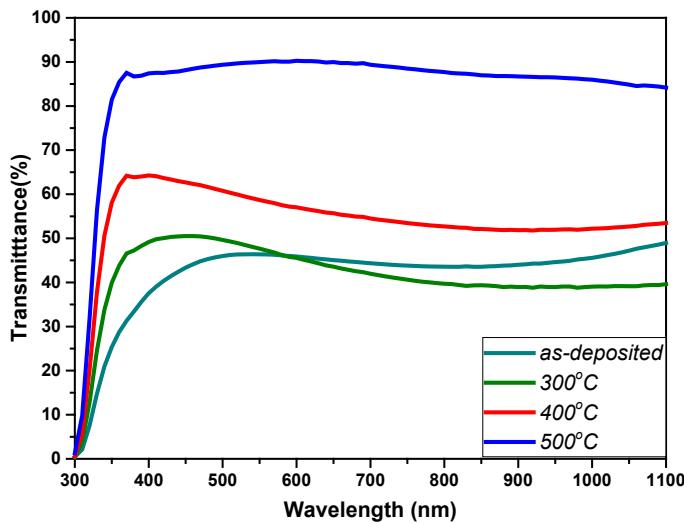


Figure 2 – Transmittance spectra of as-deposited and annealed at different temperatures antimony films

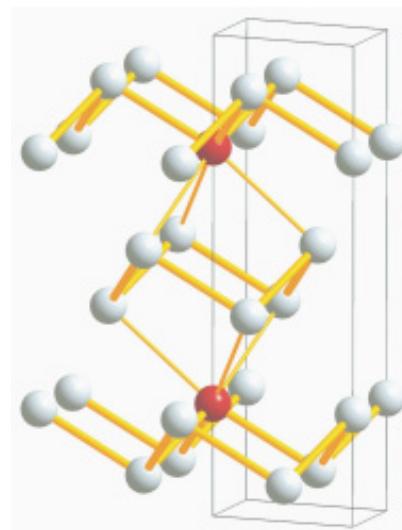


Figure 3 – Crystal structure of Sb-I (hexagonal setting) [6]

In figure 4 shown Raman spectra of our work and adapted literature data of polycrystalline and amorphous antimony recorded at room temperature [6, 8]. Since the spectra have different intensities, for correct comparison spectra of the testing samples were divided by maximum intense peak, for each spectra maximum is different at about 150 cm^{-1} . The E mode at 115 cm^{-1} identified in the red laser line. The reason of sensitivity of Sb-I phase on the excitation wavelength either high integration time or dependence of Raman scattering efficiencies

well-known $1/\lambda^4$ (λ is the excitation wavelength) [9]. Proceeding from the last assumption, more phonon modes should be identified with less exciting wavelength. The Raman spectroscopy results of annealed samples at temperatures of 300 and 400 °C confirm the morphology and transmittance spectroscopy study results of the films. The crystal structure of the films is polycrystalline with the A7 structure showed two peaks at 115 cm^{-1} and 150 cm^{-1} , in agreement with [5, 10], whereas amorphous antimony phonon (a-Sb) modes at $\sim 145\text{--}150 \text{ cm}^{-1}$ [8].

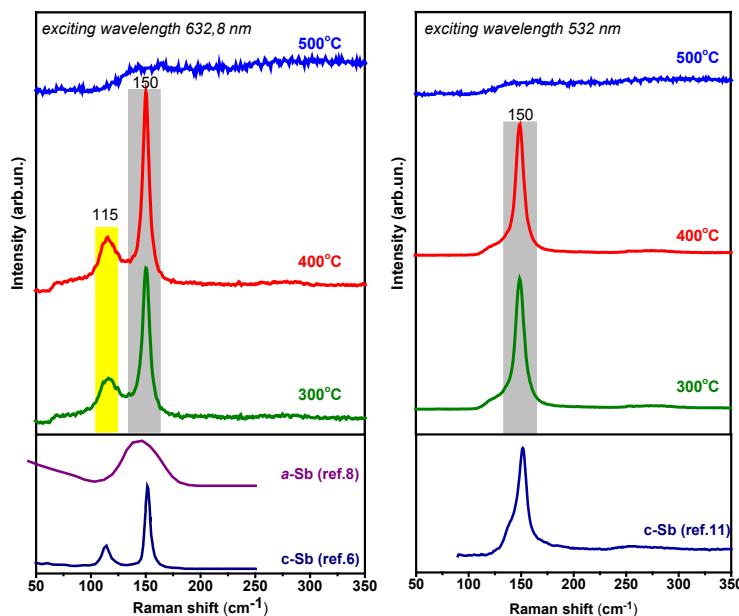


Figure 4 – Raman spectra of antimony

Conclusion

Thin films of antimony have been grown on glass substrate using RF magnetron sputtering technique and then annealed at different temperatures in order to test stability of the film structure. Analyzes of the transmission spectra and the study of surface morphology showed the stability of thin films of antimony up to 400 °C, which confirmed by high quality Raman spectroscopy measurements. The data obtained by the Raman spectroscopy method are in good agreement with the literature data obtained from high-purity antimony powders, which are A_{1g} mode at 150 cm⁻¹ and a two-fold

degenerated E_g mode at 115 cm⁻¹. In the future, the films will serve as precursors for chalcogenide structures.

Acknowledgments

The results were comprehended and processed with the support and within the framework of the implementation of the Target Financing Program “Obtaining promising photovoltaic materials. Section 02: Investigation of the characteristics of the resulting films.” The results of Raman spectroscopy were obtained at NNLOT at the Kazakh National University named after Al-Farabi.

References

- 1 Shongalova A. et al. Growth of Sb₂Se₃ thin films by selenization of RF sputtered binary precursors //Solar Energy Materials and Solar Cells. – 2018. – T. 187. – C. 219-226.
- 2 Zhou Y. et al. Thin-film Sb₂Se₃ photovoltaics with oriented one-dimensional ribbons and benign grain boundaries //Nature Photonics. – 2015. – T. 9. – №. 6. – C. 409.
- 3 Duke C. B. et al. Dynamical analysis of low-energy electron diffraction intensities from GaAs (110)-p (1×1)-Sb (1 ML) //Physical Review B. – 1982. – T. 26. – №. 2. – C. 803.
- 4 Martinez A. et al. Growth and characterization of bismuth and antimony thin films //Journal of crystal growth. – 1997. – T. 174. – №. 1-4. – C. 845-850.
- 5 Degtyareva O., Struzhkin V. V., Hemley R. J. High-pressure Raman spectroscopy of antimony: As-type, incommensurate host-guest, and bcc phases //Solid state communications. – 2007. – T. 141. – №. 3. – C. 164-167.
- 6 Wang X. et al. Effect of pressure on the Raman modes of antimony //Physical Review B. – 2006. – T. 74. – №. 13. – C. 134305.
- 7 Donohue J. Structures of the Elements. John Wiley & Sons/New York, Sydney, Toronto, 1974. – 436p.
- 8 Lannin J. S. Raman scattering properties of amorphous As and Sb //Physical Review B. – 1977. – T. 15. – №. 8. – C. 3863.
- 9 Zhao Y. et al. Phonons in Bi₂S₃ nanostructures: Raman scattering and first-principles studies //Physical Review B. – 2011. – T. 84. – №. 20. – C. 205330.
- 10 Ishioka K., Kitajima M., Misochko O. V. Coherent A_{1g} and E_g phonons of antimony //Journal of Applied Physics. – 2008. – T. 103. – №. 12. – C. 123505.
- 11 The RRUFF Project website containing an integrated database of Raman spectra, X-ray diffraction and chemistry data for minerals. URL: <http://rruff.info/Antimony/R050654> (appeal date: 19.12.2018).

References

- 1 A. Shongalova et al., Solar Energy Materials and Solar Cells, 187, 219-226 (2018).
- 2 Y. Zhou et al. Nature Photonics, 9 (6), 409 (2015).
- 3 C.B. Duke et al. Phys. Rev. B26, 2, 803 (1982).
- 4 A. Martinez et al. Journal of crystal growth, 174 (1-4), 845-850 (1997).
- 5 O. Degtyareva, V.V. Struzhkin, and R.J. Hemley, Solid state communications, 141 (3), 164-167 (2007).
- 6 X. Wang et al. Phys. Rev. B74, 13, 134305 (2006).
- 7 J. Donohue, The Structures of the Elements, (John Wiley & Sons/New York, Sydney, Toronto, 1974), 436.
- 8 J.S. Lannin, Phys. Rev. B15, 8, 3863 (1977).
- 9 Y. Zhao et al. Phys. Rev.B84, 20, 205330 (2011).
- 10 K. Ishioka, M. Kitajima, and O.V. Misochko, Journal of Applied Physics, 103 (12). 123505 (2008).
- 11 The RRUFF Project website containing an integrated database of Raman spectra, X-ray diffraction and chemistry data for minerals. URL: <http://rruff.info/Antimony/R050654> (appeal date: 19.12.2018).

**Гладких Т.¹, Козловский А.Л.^{1,2}, Кенжина И.^{1,2},
Канюков Е.³, Здоровец М.В.^{1,2}**

¹Астанинский филиал Института ядерной физики, Казахстан, г. Астана

²Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Казахстан, г. Астана

³НПЦ НАН Беларусь по материаловедению, Беларусь, г. Минск

e-mail: artem88sddt@mail.ru

ОПТИЧЕСКИЕ И СТРУКТУРНЫЕ СВОЙСТВА КЕРАМИК ALN, ОБЛУЧЕННЫХ ИОНАМИ C²⁺

Проведено исследование влияния облучения ионами C²⁺ на изменение оптических и структурных свойств керамик на основе AlN. Выбор иона C²⁺ обусловлен возможностью моделирования образования дефектов в приповерхностных слоях, а также образованием карбидных фаз в структуре при облучении. Согласно данным XRD в структуре облученных образцов наблюдается образование примесной фазы, характерной для Rhombohedral Al₄C₃, наличие которой обусловлено имплантацией ионов углерода в приповерхностные слои не более 150 нм. Снижение интенсивности TSL спектра для облученных образцов обусловлено возникновением дефектов, а также увеличением концентрации примесных атомов, которые приводят к замещению атомов Al и N в структуре. При дозе облучения 10¹⁵ ион/см² наблюдается резкое увеличение спектра поглощения и величины оптического поглощения.

Ключевые слова: керамические материалы, радиационные дефекты, хиллоки, кристаллическая структура, тяжелые ионы.

Gladkikh T.¹, Kozlovskiy A.^{1,2}, Kenzhina I.^{1,2}, Kanukov E.³, Zdorovets M.^{1,2}

¹L.N. Gumilyov Eurasian National University, Kazakhstan, Astana

²The Institute of Nuclear Physics of Republic of Kazakhstan, Kazakhstan, Astana

³SSPA "Scientific-Practical Materials Research Centre of NAS of Belarus, Belarus, Minsk

e-mail: artem88sddt@mail.ru

Optical and structural properties of AlN ceramics irradiated with C²⁺ ions

Resistance to high doses of radiation is one of the important factors of applicability of functional ceramic materials in future thermonuclear reactors. Also, nitride materials (BN, AlN, Si₃N₄) are considered as the most suitable candidates for the development of optical and diagnostic windows, insulation materials, reactor walls. The effect of irradiation with C²⁺ ions on changes in optical and structural properties of AlN-based ceramics has been studied. The choice of C²⁺ ions is due to the possibility of modeling defects formation in the surface layers, as well as the formation of carbide phases in the structure during irradiation. According to XRD data, the formation of an impurity phase characteristic of the Rhombohedral Al₄C₃ is observed in the structure of irradiated samples, the presence of which is due to the implantation of carbon ions into the surface layers of not more than 150 nm. The decrease in the intensity of the TSL spectrum for irradiated samples is due to the appearance of defects, as well as an increase in the concentration of impurity atoms. That leads to the substitution of Al and N atoms in the structure. At the irradiation dose of 10¹⁵ ion/cm², there is a sharp increase in the absorption spectrum and the magnitude of the optical absorption.

Key words: ceramic materials, heavy ions, hillocks, crystal surface, radiation defects.

Гладких Т.¹, Козловский А.Л.^{1,2}, Кенжина И.^{1,2},
Канюков Е.³, Здоровец М.В.^{1,2}

¹А.Н. Гумилев атындағы Еуразия үлттых университеті, Қазақстан, Астана қ.

²Ядролық физика Институтының филиалы, Қазақстан, Астана қ.

³Белоруссияның УФА материалтану бойынша Ғылыми-Практикалық Орталығы, Беларусь, Минск қ.
e-mail: artem88sddt@mail.ru

C²⁺ иондарымен сәулеленген AlN керамикаларының құрылымдық және оптикалық қасиеттері

AlN-негізделген керамиканың оптикалық және құрылымдық қасиеттеріндегі өзгерістерге C²⁺ иондарымен сәулеленудің әсеріне зерттеу жүргізді. C²⁺ ионын таңдау бетон қабаттарындағы ақаулардың қалыптасуын, сондай-ақ сәүле кезінде құрылымда карбидтік фазалардың пайда болуын модельдеу мүмкіндігімен байланысты. XRD деректеріне сәйкес, Rhombohedral Al₄C₃ қоспасының фазалық сипаттамасын қалыптастыру сәулелендірілген үлгілердің құрылымында байқалады, олардың болуы көміртек иондарының беттік қабаттарға 150 нм-нен артық емес имплантациясына байланысты. Сәулеленген үлгілер үшін TSL спектрінің қарқындылығының төмендеуі ақаулардың пайда болуымен, сондай-ақ, құрамында Al және N атомдарының алмасырылуына әкелетін қоспалардың атомдарының концентрациясының артуымен байланысты. 10¹⁵ ион/см² сәулелену дозасы көмегімен абсорбция спектрі мен оптикалық сініру шамасының күрт үлғаюы байқалады.

Түйін сөздер: керамикалық материалдар, радиациялық ақаулар, хиллоктар, кристалды құрылым, ауыр иондар.

Введение

Общеизвестно, что накопление радиационно-индуцированных дефектов кристаллической структуры оказывает сильное влияние на функциональность различных функциональных и особенно оптических компонентов [1-3]. В случае облучения потоками нейтронов в структуре наблюдается образование вакансационных дефектов и пар Френкеля, которые являются основной причиной радиационного повреждения материалов. Однако из-за малой доступности исследовательских реакторов и высокой остаточной радиоактивности, для моделирования эффектов облучения нейтронами и отслеживания динамики изменения структурных свойств и рабочих характеристик можно использовать ускорители тяжелых ионов [4-7]. При этом облучение тяжелыми ионами инициирует изменение химических и физических свойства материала за счет образования каскадных дефектов и последующей быстрой диссиляции энергии в приповерхностных областях материала [8-10]. В то же время в структуре могут возникнуть дополнительные искажения и напряжения, которые влияют на механические свойства, а облучение высокими флюенсами (выше 10¹⁴ ион/см²) может привести к частичной или полной аморфизации кристаллической структуры. При облучении низкоэнергетичными ионами (до 0.1 МэВ) доминирующими являются ядерные потери, в результате чего в структуре наблюдаются как баллистические эффекты, так и эффекты пере-

мешивания за счет формирования термических пиков. При этом данные эффекты наблюдаются в малом приповерхностном слое толщиной не более 100-500 нм [11,12]. В свою очередь точная информация о процессах взаимодействия налетающих ионов со структурой материала, а также последующих за этим фазовых превращениях необходима как для фундаментальных исследований, так и прогнозирования радиационной стойкости конструкционных материалов подверженных радиации [13-15].

В работе представлены результаты изучения влияния облучения ионами C²⁺ с энергией 40 кэВ на структурные и оптические свойства керамики AlN, интерес к которым обусловлен применению AlN в качестве материала для ядерной энергетики обусловлен высокой коррозионной стойкостью и радиационной устойчивостью к продуктам деления, а также малым поперечным сечением захвата тепловых нейтронов.

Экспериментальная часть

Облучение образцов AlN (CRYSTAL GmbH, Germany) проводилось на ускорителе тяжелых ионов «ДЦ-60» Астанинского филиала Института Ядерной Физики ионами C²⁺ с энергией 40 кэВ с флюенсом от 10¹⁴ до 10¹⁵ ион/см² при температуре облучения 300 К. Согласно расчетам максимальной длины пробега и энергетических потерь налетающих ионов выполненных с помощью программного кода SRIM Pro 2013, максимальная длина пробега ионов C²⁺ с энергией

20 кэВ/заряд составляет 136 ± 10 нм, радиальное отклонение – 35 ± 5 нм, количество вакансий создаваемых одним ионом составило 268 ± 20 вакансий/ион. Энергетические потери ионов на электронах $dE/dx_{elec} = 0.32$ кэВ/нм, энергетические потери на ядрах $dE/dx_{nuclear} = 0.12$ кэВ/нм, энергия первично-выбитого атома составляет 25 эВ, в то время как энергия связи атомов в кристаллической решетке составляет 3.36 эВ.

Рентгеноструктурный анализ (XRD) проводился на дифрактометре D8 ADVANCE ECO (Bruker, Германия) при использовании излучения CuKa. Для идентификации фаз и исследования кристаллической структуры использовалось программное обеспечение BrukerAXS DIFFRAC.EVAv.4.2 и международная база данных ICDD PDF-2. Условия съемки рентгеновских дифрактограмм: Напряжение – 10 кВ, Ток – 5 мА, $2\theta = 30\text{--}55^\circ$, в качестве поглотителя использовался никелевый соллер. При данных условиях съемки глубина проникновения рентгеновских лучей в материал составляет не более 300 нм.

Измерения термически индуцированной люминесценции (TSL) проводились при возбуждении образцов при комнатной температуре в течение десяти минут ультрафиолетовой лампой дейтерия (50 Вт). После возбуждения снятие TSL спектров проводилось при линейном нагреве образцов в диапазоне 300 – 673 К с помощью оптического многоканального анализатора в диапазоне 300-800 нм.

Результаты и обсуждение

На рисунке 1 представлены фрагменты рентгеновских дифрактограмм образцов до и после облучения с наиболее выраженными изменениями дифракционной картины.

Исследуемые исходные образцы представляют собой поликристаллические структуры с гексагонального типа решеткой пространственной сингонии Р63mc (186). В структуре исходного образца обнаружено наличие примесной фазы Al_2O_3 – триклинической кристаллической структуры пространственной сингонии Р1(1), в процентном содержании не более 4.5%, присутствие которой обусловлено технологическими процессами получения.

Для облученных образцов наблюдается формирование фазы Al_4C_3 , ромбовидной кристаллической структуры пространственной сингонии R-3m(166), наличие которой обусловлено процессами имплантации ионов C²⁺ в приповерхностные слои и замещением ионов азота ионами

углерода в кристаллической решетке. Увеличение дозы облучения до 10^{15} ион/см² приводит к резкому снижению интенсивностей и уширению дифракционных линий характерных для AlN, а также сильной асимметрии дифракционных линий и смещению максимумов в область малых углов, что свидетельствует об образовании в структуре дополнительных напряжений и деформаций в результате облучения. В ходе исследования было установлено, что увеличение дозы облучения до 10^{15} ион/см² приводит к увеличению вклада примесных фаз и снижению концентрации основной фазы AlN. При энергиях налетающих ионов меньше 0.3-0.5 МэВ при взаимодействии ионов с кристаллической решеткой доминирует перенос энергии на атомные ядра (ядерные потери), приводящие к смещению атомов в результате упругих столкновений, а также баллистических каскадах. При этом в случае если энергии налетающих ионов хватает для создания первично выбитого атома, в решетке появляется вакансия, которую может занять налетающий ион. Увеличение концентрации примесных фаз в структуре приводит к дополнительнымискажениям межплоскостных расстояний и деформации кристаллической решетки, которые могут оказывать существенное влияние на оптические свойства керамик. В таблице 1 представлены результаты изменения кристаллографических характеристик (параметры кристаллической решетки, средний размер кристаллитов, плотности) в результате облучения.

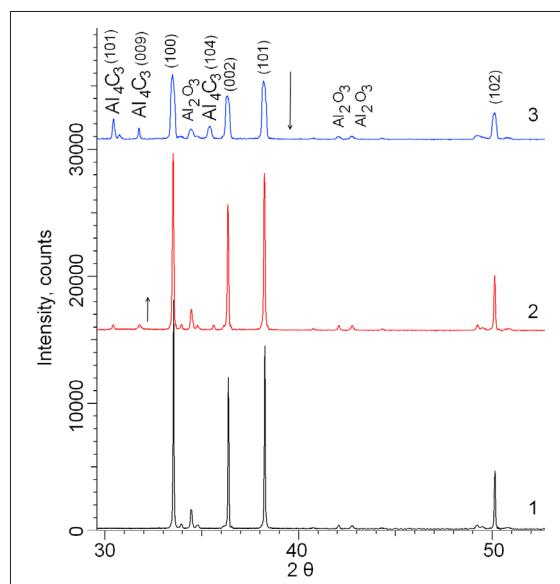


Рисунок 1 – Фрагмент рентгеновской дифрактограммы исследуемых образцов до и после облучения:
1) исходный; 2) 10^{14} ион/см²; 3) 10^{15} ион/см²

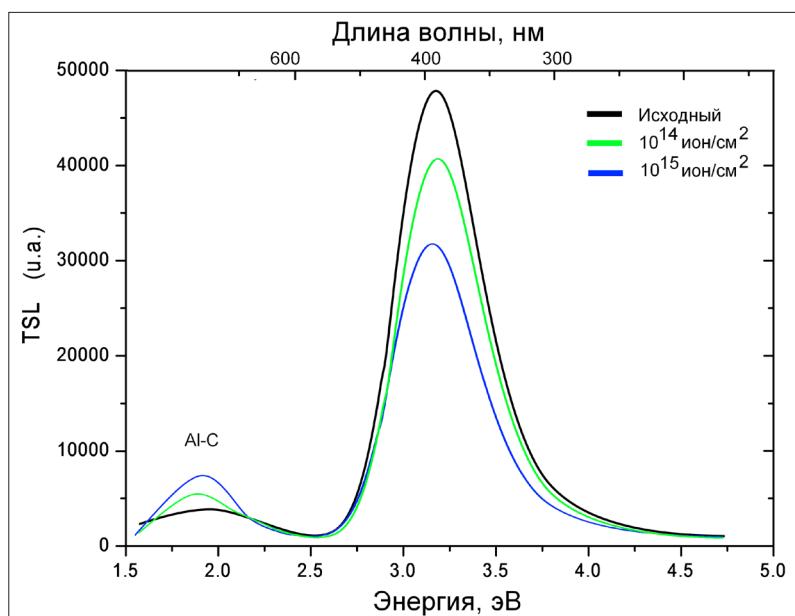
Таблица 1 – Данные кристаллографических характеристик

№	Исходный	10^{14} ион/см ²	10^{15} ион/см ²
Параметр кристаллической решетки с/а	1.6008 ± 0.0005	1.6027 ± 0.0003	1.6043 ± 0.0004
Размер кристаллитов, нм	103.21 ± 5.31	92.23 ± 3.45	78.37 ± 4.64
Плотность, г/см ²	3.261	3.251	3.237
Плотность дислокаций, м ² · 10^{15}	0.078	0.124	0.332

Как видно из представленных данных увеличение флюенса облучения и внедрение ионов углерода в междоузлие приводит к искажению кристаллической решетки и увеличению параметра с/а, который характеризует деформацию решетки под действием внешних факторов. Увеличение деформации кристаллической решетки приводит к изменению ее размеров и следовательно изменению плотности материала. Снижение плотности керамики под действием облучения обусловлено образованием в структуре областей разупорядоченности вызванные миграцией дефектов и увеличением концентрации примесных фаз. При этом в результате облучения наблюдается уменьшение размеров кристаллитов, которое обусловлено процессами дробления и увеличение плотности дислокаций в структуре и следовательно снижению подвижности зерен, что приводит к существенному изменению оптических и проводящих характеристик керамики. Изменение плот-

ности поликристаллической структуры приводит к интенсификации процессов накопления дислокаций, а дробление кристаллитов приводит к уменьшению диффузионных расстояний между границами зерен и следовательно увеличению скорости формирования и миграции дислокаций в структуре. Резкое возрастание плотности дислокаций при дозе облучения 10^{15} ион/см² свидетельствует о дислокационно-деформационной неустойчивости и последующей эволюции дислокаций в структуре.

Для оценки влияния флюенса облучения на оптические свойства керамики были применены методы термически индуцированной люминесценции (TSL) и оптической абсорбции. На рисунке 2 представлена динамика эволюции спектров излучения TSL основного пика при 400 К в зависимости от условий облучения. Положение спектральных линий определялось при помощи гауссовского разложения.

**Рисунок 2** – Спектральное распределение основного пика TSL (400 К) в зависимости от флюенса облучения

Спектральная линия при 3.2 эВ наблюдаемая на спектре относится к основным центрам рекомбинации в AlN. Наличие малых максимумов при 1.8 – 2.0 эВ обусловлено увеличением концентрации примесей в структуре в результате внедрения ионов углерода. Снижение интенсивности для облученных образцов обусловлено возникновением дефектов, а также увеличением

примесных атомов, которые приводят к замещению атомов Al и N в структуре. Возникновение дополнительных дефектов в структуре приводит к поглощению TSL центров и снижению интенсивности спектров.

На рисунке 3 представлены спектры оптического поглощения керамик до и после облучения.

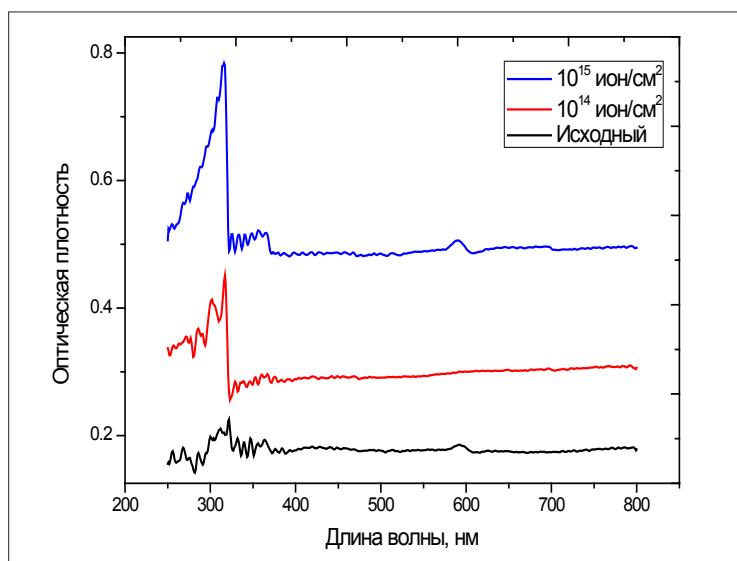


Рисунок 3 – Спектры оптического поглощения образцов до и после облучения

Как видно из представленных данных в результате облучения в спектре поглощения не наблюдается появление новых пиков поглощения. При этом увеличение флюенса облучения приводит к увеличению пика спектра поглощения в области 270-320 нм, что обусловлено увеличением концентрации поглощающих дефектов в структуре приповерхностного слоя, связанных с внедрением ионов углерода в междуузлия решетки. При дозе облучения 10¹⁵ ион/см², когда концентрация дефектов связанных с образованием примесной карбидной фазы Al₄C₃, наблюдается резкое увеличение спектра поглощения и величины оптического поглощения. При этом увеличение величины поглощения при больших флюенсах свидетельствует об увеличении дефектов в структуре в результате перекрытия ионов и образование каскадов дефектов и примесных включений.

Заключение

На основе полученных данных установлены зависимости изменения кристаллографических характеристик, оптических и проводящих свойств от дозы облучения ионами C²⁺ с энергией 40 кэВ. Установлено, что в результате облучения в приповерхностном слое наблюдается формирование примесной фазы Al₄C₃, приводящей к изменению плотности керамик и среднего размера кристаллитов, что свидетельствует об имплантации ионов C²⁺ и формировании фазы внедрения в структуре. Определено, что увеличение концентрации примесных фаз в структуре приводит к дополнительным искажениям межплоскостных расстояний и деформации кристаллической решетки, которые оказывают существенное влияние на оптические свойства керамик. При дозе облучения 10¹⁵ ион/см², на-

блодается резкое увеличение спектра поглощения и величины оптического поглощения, что свидетельствует об увеличении концентрации дефектов в структуре. Полученные результаты хорошо согласуются с проделанными ранее ра-

ботами по исследованию радиационных дефектов в керамиках на основе AlN, а также могут внести вклад в понимание процессов дефектообразования при облучении низкоэнергетичными тяжелыми ионами.

Литература

- 1 Milosavljević M. et al. A comparison of Ar ion implantation and swift heavy Xe ion irradiation effects on immiscible AlN/TiN multilayered nanostructures //Materials Chemistry and Physics. – 2012. – Vol. 133. – №. 2-3. – P. 884-892.
- 2 Nappé J. C. et al. Effect of swift heavy ion irradiations in polycrystalline aluminum nitride //Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. – 2011. – Vol. 269. – №. 2. – P. 100-104.
- 3 Kozlovskiy A. et al. Effect of swift heavy ions irradiation on AlN ceramics properties //Ceramics International. – 2018. – Vol. 44. – №. 16. – P. 19787-19793.
- 4 Gerlich D., Dole S. L., Slack G. A. Elastic properties of aluminum nitride //Journal of Physics and Chemistry of Solids. – 1986. – Vol. 47. – №. 5. – P. 437-441.
- 5 Mote V. D., Purushotham Y., Dole B. N. Williamson-Hall analysis in estimation of lattice strain in nanometer-sized ZnO particles //Journal of Theoretical and Applied Physics. – 2012. – Vol. 6. – №. 1. – P. 6.
- 6 Li J. et al. Evolution of amorphization and nanohardness in SiC under Xe ion irradiation //Journal of Nuclear Materials. – 2014. – Vol. 454. – №. 1-3. – P. 173-177.
- 7 Skuratov V. A. et al. On the threshold of damage formation in aluminum oxide via electronic excitations //Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. – 2014. – Vol. 326. – P. 223-227.
- 8 Schwartz K. et al. Effect of electronic energy loss and irradiation temperature on color-center creation in LiF and NaCl crystals irradiated with swift heavy ions //Physical Review B. – 2008. – Vol. 78. – №. 2. – P. 024120.
- 9 Ushenko Y. A. et al. Optical constants and polarimetric properties of AlN thin films //Thirteenth International Conference on Correlation Optics. – International Society for Optics and Photonics, 2018. – Vol. 10612. – P. 106121A.
- 10 Yazdi G. R., Syväjärvi M., Yakimova R. Growth and morphology of AlN crystals //Physica Scripta. – 2006. – Vol. 2006. – №. T126. – P. 127.
- 11 Dienst W. Reduction of the mechanical strength of Al₂O₃, AlN and SiC under neutron irradiation //Journal of nuclear materials. – 1992. – Vol. 191. – P. 555-559.
- 12 Zinkle S. J., Skuratov V. A., Hoelzer D. T. On the conflicting roles of ionizing radiation in ceramics //Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. – 2002. – Vol. 191. – №. 1-4. – P. 758-766.
- 13 Sayyad A. S., Ghugal Y. M. Modeling and analysis of functionally graded sandwich beams: A review //Mechanics of Advanced Materials and Structures. – 2018. – P. 1-20.
- 14 He Y. et al. An analysis of deformation mechanism in the Si₃N₄-AgCuTi+SiCp-Si₃N₄ joints by digital image correlation //Journal of the European Ceramic Society. – 2013. – Vol. 33. – №. 1. – P. 157-164.
- 15 Milosavljević M. et al. Ion irradiation stability of multilayered AlN/TiN nanocomposites //Journal of Physics D: Applied Physics. – 2010. – Vol. 43. – №. 6. – P. 065302.

References

- 1 M. Milosavljević, Materials Chemistry and Physics. 133(2-3), 884-892 (2012).
- 2 J.C. Nappé, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. 269(2), 100-104 (2011).
- 3 A.L. Kozlovskiy, Ceramics International. 44(16), 19787-19793 (2018).
- 4 D. Gerlich, Journal of Physics and Chemistry of Solids. 47(5), 437-441 (1986).
- 5 V.D. Mote, Journal of Theoretical and Applied Physics. 6(1), 6 (2012).
- 6 J. Li, Journal of Nuclear Materials. 454(1-3), 173-177 (2014).
- 7 V.A. Skuratov, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. 326, 223-227 (2014).
- 8 K. Schwartz, Physical Review B. 78(2), 024120 (2008).
- 9 Y.A. Ushenko, International Society for Optics and Photonics. 10612, 106121A (2018).
- 10 G.R. Yazdi, Physica Scripta. 2006(T126), 127 (2006).
- 11 W. Dienst, Journal of nuclear materials. 191, 555-559 (1992).
- 12 S.J. Zinkle, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. 191(1-4), 758-766 (2002).
- 13 A.S. Sayyad, Mechanics of Advanced Materials and Structures. 1-20, (2018).
- 14 Y. He, Journal of the European Ceramic Society. 33(1), 157-164 (2013).
- 15 M. Milosavljević, Journal of Physics D: Applied Physics. 43(6), 065302 (2010).

**Ибраев Е.С.¹, Суюндыкова А.С.¹, Партизан Г.^{1,2},
Накысбеков Ж.Т.¹**

¹Казахский национальный университет им. аль-Фараби,
Физико-технический факультет, Казахстан, г. Алматы

²Центр инновационных технологий Института проблем горения, Казахстан, г. Алматы
e-mail: gulmira.partizan@mail.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ НАНОПОРОШКОВ МЕТАЛЛОВ МЕТОДОМ ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ

В работе представлены результаты экспериментов по исследованию нанопорошков металлов методом сканирующей электронной микроскопии сверхвысокого разрешения и просвечивающей микроскопии. Электронная микроскопия является одним из основных методов изучения наноматериалов, позволяющим непосредственно увидеть исследуемые объекты. В сканирующем электронном микроскопе для получения изображения поверхности образца используются вторичные, отраженные и поглощенные электроны. Остальные излучения применяются как дополнительные источники информации. Результаты сканирующей электронной микроскопии показали, что нанокластеры никеля и железа имеют форму, близкую к сферической со средними диаметрами 50 и 65 нм, соответственно. Результаты исследований методом просвечивающей электронной микроскопии НП никеля и железа согласуются с результатами, полученными с помощью сканирующей электронной микроскопии сверхвысокого разрешения. В отличие от НП никеля и железа гистограмма распределения по размерам НП меди имеет бимодальное распределение. Средний диаметр частиц первой и второй фракций равен 23.6 и 81 нм, соответственно. Исследования НП меди методом сканирующей электронной микроскопии сверхвысокого разрешения и просвечивающей электронной микроскопии показали, что нанокластеры меди обладают четко выраженным кристаллографическими гранями и ребрами.

Ключевые слова: нанопорошки, электрический взрыв проводников, сканирующая электронная микроскопия, просвечивающая электронная микроскопия.

Ibraev E.S.¹, Suyundykova A.S.¹, Partizan G.^{1,2}, Nakysbekov Zh.T.¹

¹Al-Farabi Kazakh National University, Physical-Technical Faculty, Kazakhstan, Almaty

²Center for Innovative Technologies the Institute of Combustion Problems, Kazakhstan, Almaty
e-mail: gulmira.partizan@mail.ru

Investigation of metal nanopowders by the method of electron microscopy

This article presents the results of experiments on the study of metal nanopowders by the method of ultrahigh resolution scanning electron microscopy and transmission microscopy. Electron microscopy is one of the main methods of studying nanomaterials that allows you to directly see the objects under study. In a scanning electron microscope, secondary, reflected and absorbed electrons are used to obtain the image of the sample surface. The remaining emissions are used as additional sources of information. The results of scanning electron microscopy showed that nickel and iron nanoclusters are close to a spherical shape with an average diameter of 50 and 65 nm, respectively. The results of studies by transmission electron microscopy of NP of nickel and iron are consistent with the results obtained using ultrahigh resolution scanning electron microscopy. In contrast to NP of nickel and iron, the histogram of the size distribution of copper NP has a bimodal distribution. The average particle diameter of the first and second fraction is 23.6 and 81 nm, respectively. The results of scanning and

transmission electron microscopy showed that copper nanoclusters have distinct crystallographic faces and edges.

Key words: nanopowders, electrical explosion of conductors, scanning electron microscopy, transmission electron microscopy.

Ибраев Е.С.¹, Суондыкова А.С.¹, Партизан Г.^{1,2}, Нақысбеков Ж.Т.¹

¹Әл-Фараби атындағы Қазак ұлттық университеті, Қазақстан, Алматы қ.

²Инновациялық технологиялар орталығы Жаңу проблемалар институты, Қазақстан, Алматы қ.

e-mail: gulmira.partizan@mail.ru

Металл наноұнтақтарын электрондық микроскопия әдісімен зерттеу

Мақалада металл наноұнтақтарын жоғары ажырату қабілетіне ие сканирлеуші электрондық микроскопия және жарықтандыруышы микроскопия әдістерімен зерттеудің нәтижелері көлтірілген. Электрондық микроскопия әдісі зерттеу отырған объектінің көруге бірден-бір мүмкіндік беретін наноматериалдарды зерттеу әдістерінің бірі болып табылады. Сканирлеуші электрондық микроскопта үлгінің беттік қабатының суретін алу үшін жұтылған, шашыраған және екінші ретті электрондар қолданылады. Қалған сәулешіліктердің қосымша ақпарат көзінде қолданылады. Сканирлеуші электрондық микроскопия нәтижелері никель мен темір наноұнтақтарының сәйкесінше 50 және 65 нм тең болатын диаметрлі сфералық формага жақын пішінге ие екендігін көрсетті. Никель мен темір наноұнтақтары үшін жарықтандыруышы электрондық микроскопия әдісінің нәтижелері сканирлеуші электрондық микроскопия әдісімен алынған нәтижелермен сәйкес келетіндігін көрсетті. Мыс наноұнтағының никель мен темір наноұнтақтарынан айырмашылығы өлшемі бойынша таралу гистограммасы бимодальды таралуға ие екендігінде. Бірінші және екінші фракциясындағы бөлшектердің орташа өлшемі сәйкесінше 23.6 және 81 нм ие. Сканирлеуші электрондық микроскопия және жарықтандыруышы электрондық микроскопия әдістерімен зерттеу нәтижелері бойынша мыс наноұнтақтары нақты айқындалған кристаллографиялық қыры мен жақтары бар пішінге ие екендігін көрсетті.

Түйін сөздер: наноұнтақтар, өткізгіштердің электрлік жарылуы, сканирлеуші электрондық микроскопия, жарықтандыруышы электрондық микроскопия.

Введение

В развитии современных нанотехнологий значительную роль играют исследования наночастиц металлов. Это обусловлено, прежде всего, широким спектром возможностей их практического применения, в которых используются специфические свойства как самих наночастиц, так и модифицированных ими материалов. Наиболее разработаны, на сегодняшний день, возможности использования наночастиц металлов при создании новых материалов в качестве катализаторов [1-14].

В настоящее время разработан ряд общих методов получения наночастиц, большинство из которых могут быть использованы для получения металлических наночастиц. Одним из перспективных методов получения нанопорошков (НП) является электрический взрыв проводников (ЭВП) – неравновесный процесс, при котором под действием импульсного электрического тока проводник диспергируется, и продукты взрыва перемешиваются с окружающей средой [15-20]. Электровзрывные НП обладают рядом преимуществ в сравнении с НП, полученными другими способами: устойчивы к окислению и

спеканию при комнатной температуре, при нагревании характеризуются высокой химической и диффузионной активностью [21-23].

В работе представлены результаты исследований морфологии и структуры НП металлов, полученных методом ЭВП методами сканирующей и просвечивающей микроскопий.

Детали эксперимента

НП металлов были получены методом электровзрывного испарения металлической проволоки в атмосфере аргона. Процедура и детали экспериментов детально описаны в работах [24, 25].

Образцы были изучены методом растровой электронной микроскопии с использованием автоэмиссионного сканирующего электронного микроскопа сверхвысокого разрешения фирмы Zeiss модели Gemini Ultra 55 вместе с устройством для рентгеноспектрального микроанализа исследуемого образца в микроскопе от фирмы – «Thermo Scientific». Кроме того, для оценки чистоты образцов был проведен рентгеноспектральный микроанализ (EDX).

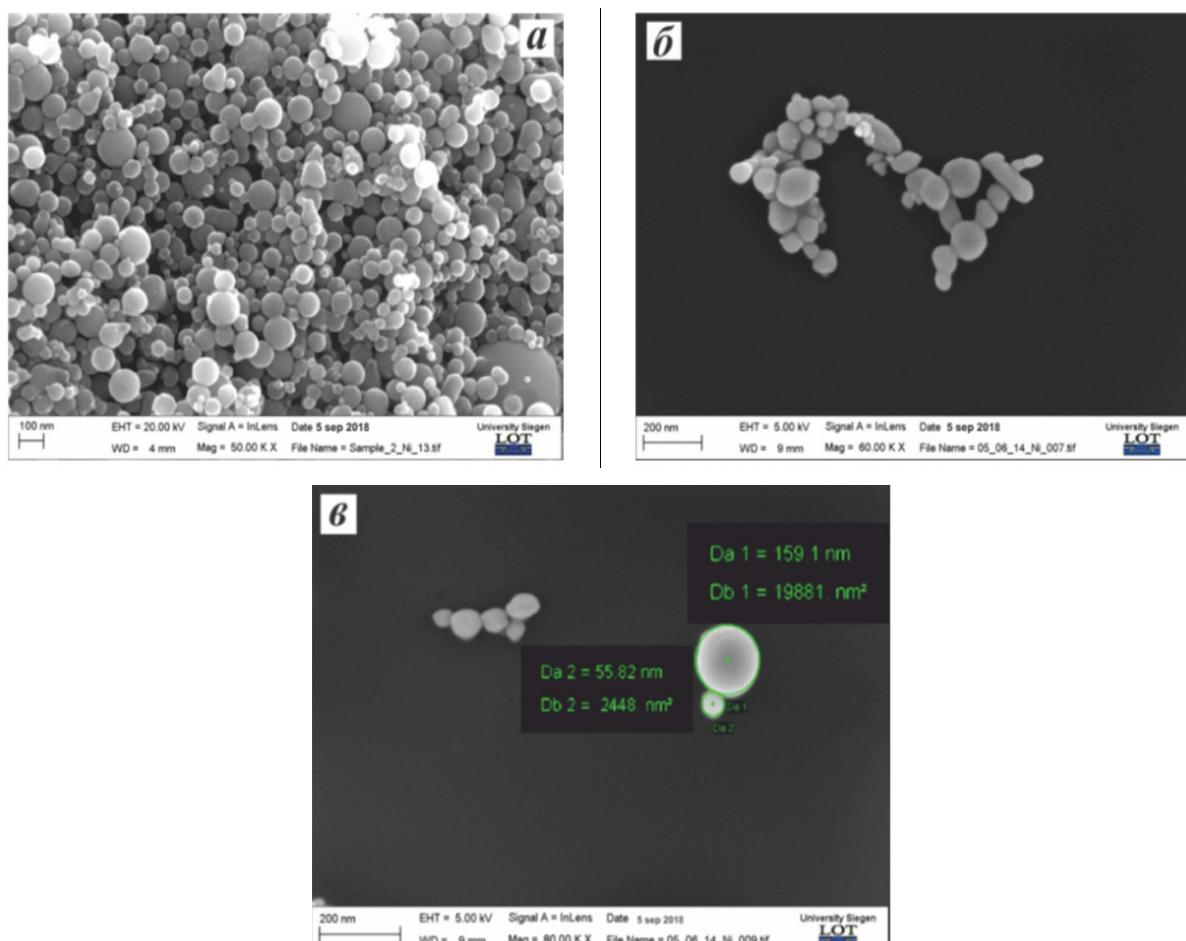
Так же были проведены исследования в центре электронной микроскопии и спектро-

скопии Эрнста Руска (Ernst Ruska-Centre for Microscopy and Spectroscopy with Electrons, Германия) с использованием просвечивающего электронного микроскопа (ПЭМ) FEI Titan (60-300) и в Институте ядерной физики (Алматы, Казахстан) с помощью ПЭМ JEM-2100 JEOL. Для проведения сепарации образцы НП суспензировались в химических растворах (гексан, изопропанол). Далее проводилась ультразвуковая обработка раствора (объем

сuspensionи 30 мл, частота ультразвука 27 кГц, мощность генератора 120 Вт, воздействие проводилось в течение 30 минут), после чего капли суспензии с частицами металла наносились на кремниевую подложку.

Результаты и обсуждение

На рисунке 1 представлены СЭМ изображения НП никеля и сепарированных образцов.



нанопорошки (а), агломераты нанокластеров (б) и отдельные нанокластеры (с) после сепарации в гексане

Рисунок 1 – СЭМ изображения НП никеля

На СЕМ изображениях Ni видно, что размеры подавляющего числа частиц не превышает 100 нм. При этом наблюдается образование цепочечных структур из мелких частиц (от 10 до 30 нм), а также частичное их спекание между собой (образуются так называемые шейки). Форма частиц Ni так же близка к сферической. На

рисунке 2 представлен энергодисперсионный спектр ЭВП НП Ni.

Как видно из спектра EDX, в составе порошка Ni присутствуют в незначительном количестве примеси углерода и кислорода, что в принципе является нормальным т.к. наиболее устойчивым для никеля является состояние окисления. На-

личие примеси углерода объясняется условиями процедуры пассивации порошков.

На рисунке 3 представлены ПЭМ-изображение и гистограмма распределения по размерам ЭВП НП Ni.

Результаты ПЭМ исследований НП никеля согласуются с результатами, полученными с помощью СЭМ. На рисунке 3а видно, что частицы

НП никеля имеют сферическую форму. Из данных гистограммы следует, что в образце преобладают частицы диаметром 40-70 нм, средний диаметр которых равен 50 нм. Анализ гистограммы показывает, что распределение наночастиц никеля по размерам является гауссовым со значением среднеквадратического отклонения = 36,6 нм.

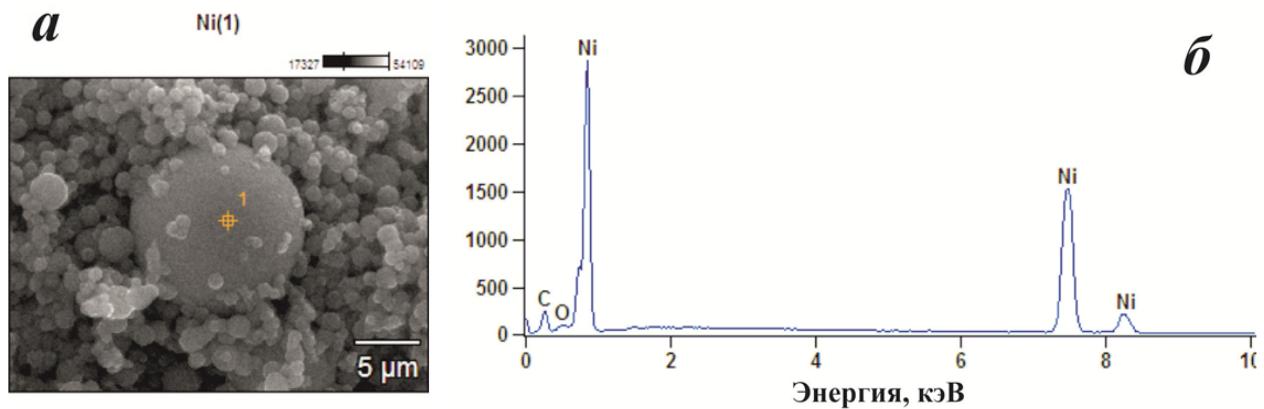


Рисунок 2 – Микрофотография порошка Ni (а) и энергодисперсионный рентгеновский спектр (б)

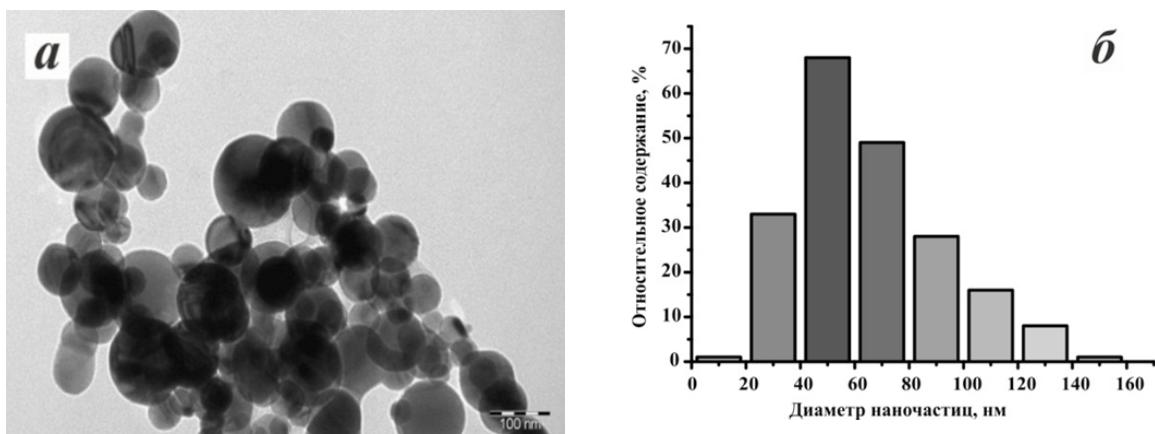
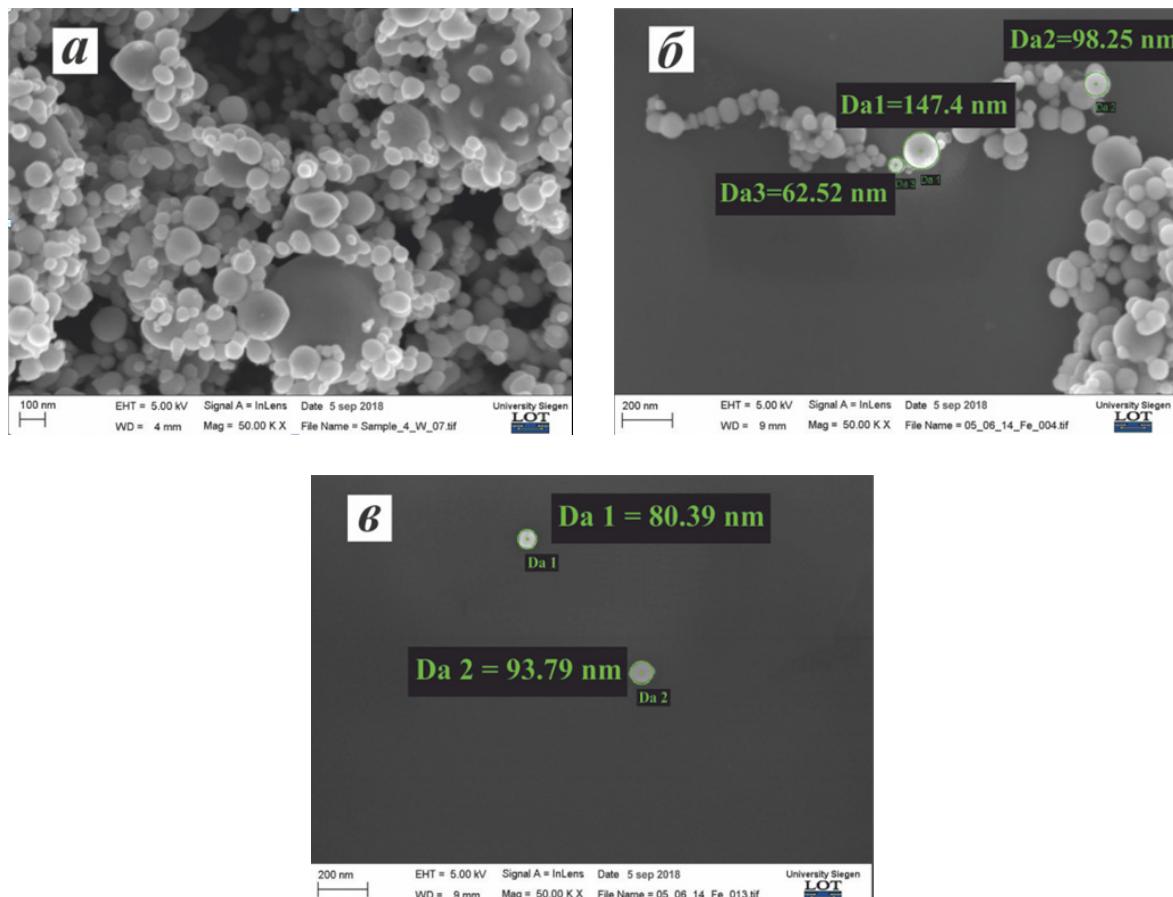


Рисунок 3 – ПЭМ-изображение НП никеля (а) и гистограмма распределения по размерам (б)

На рисунке 4 представлены СЭМ-изображения НП железа и сепарированных образцов. На СЭМ изображениях порошка Fe видно, что присутствует агломерация вокруг кластеров размерами от 100 до 200 нм металлических частиц с меньшими размерами (от 10 до 50 нм). При этом наблюдается образование цепочек структур из мелких частиц (от 10 до 30 нм). Форма частиц Fe близка к сферической.

В агломератах частицы с большим диаметром, как правило, коагулируют с более мелкими кластерами. Из рисунков 4б и 4в видно, что гексан позволяет сепарировать отдельные нанокластеры железа. При этом диаметр кластеров колеблется от 50 до 100 нм.

На рисунке 6 представлены ПЭМ-изображение и гистограмма распределения по размерам НП железа.



нанопорошки (а), агломераты нанокластеров (б) и отдельные нанокластеры (с) после сепарации в гексане

Рисунок 4 – СЭМ изображения НП железа

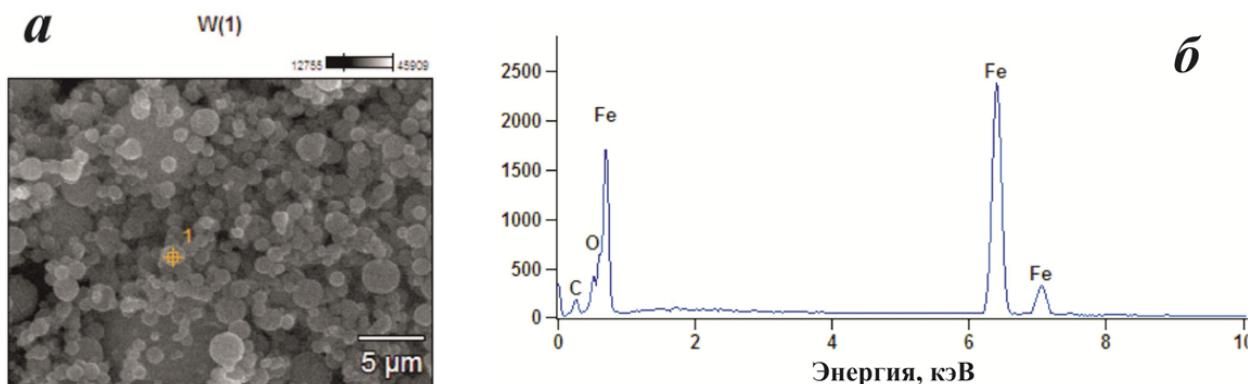


Рисунок 5 – Микрофотография порошка Fe (а) и энергодисперсионный рентгеновский спектр (б)

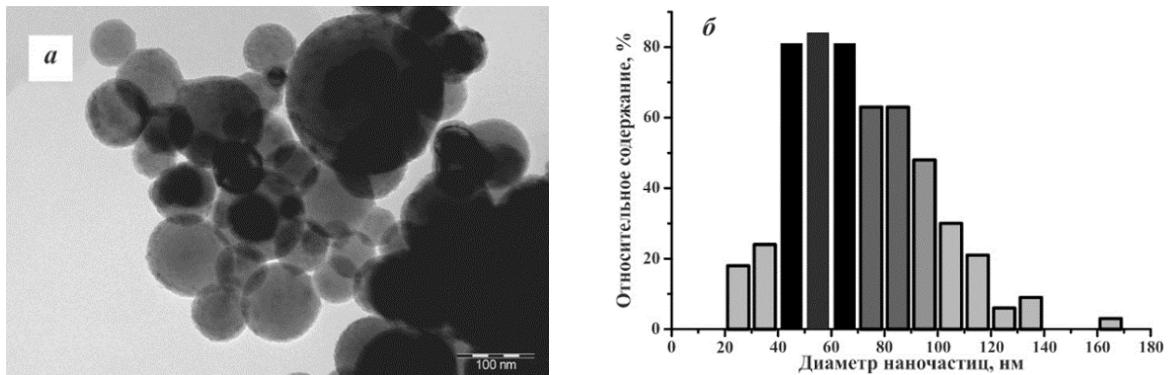
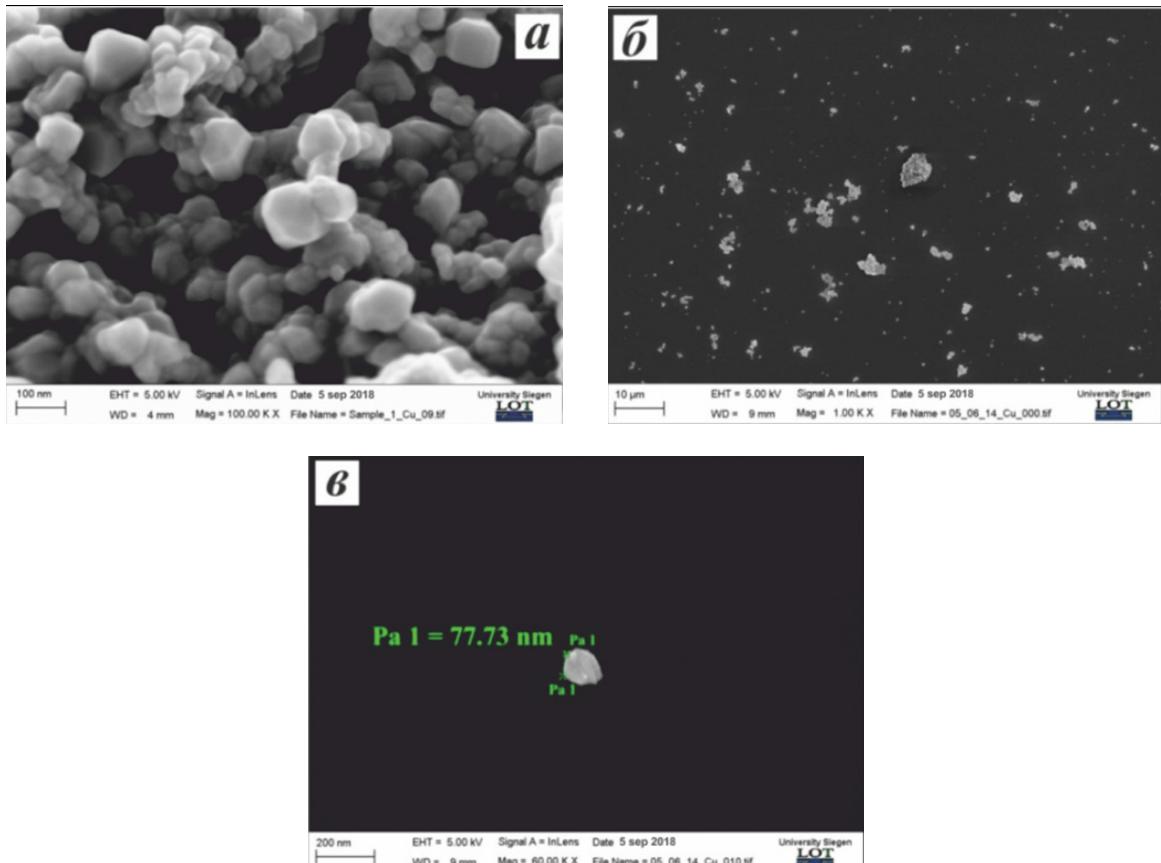


Рисунок 6 – ПЭМ-изображение НП железа (а) и гистограмма распределения по размерам (б)

Результаты ПЭМ исследований НП железа согласуются с результатами, полученными с помощью СЭМ. На рисунке ба видно, что частицы НП железа имеют сферическую форму. Из данных гистограммы следует, что в образце преобладают частицы диаметром 40-70 нм, средний диаметр которых равен 65,5 нм. Анализ гисто-

грамммы показывает, что распределение наночастиц железа по размерам является гауссовым со значением среднеквадратического отклонения = 30 нм.

На рисунках 7, 8 представлены результаты исследований порошков Cu методом сканирующей электронной микроскопии



нанопорошки (а), агломераты нанокластеров (б) и отдельные нанокластеры (с) после сепарации в гексане

Рисунок 7 – СЭМ изображения НП меди

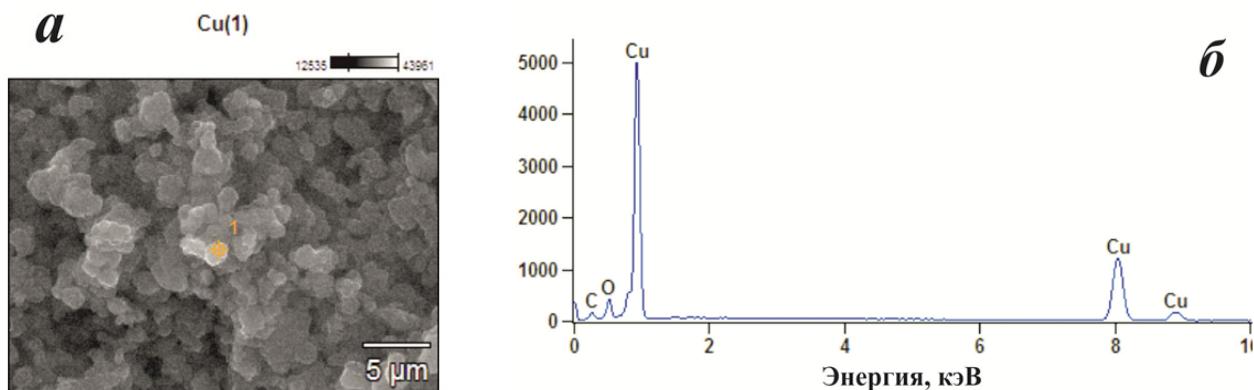


Рисунок 8 – Микрофотография порошка Cu (а), энергодисперсионный рентгеновский спектр (б)

На рисунке 9 представлены ПЭМ изображение и гистограмма распределения по размерам НП меди.

Результаты ПЭМ исследований НП меди согласуются с результатами, полученными с помощью СЭМ. В отличие от НП никеля и железа НП меди имеют бимодальное распределение. Средний диаметр частиц первой и второй

фракции равен 23,6 и 81 нм соответственно. На рисунке 10 представлены микрофотографии нанокластеров меди, полученные методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ). На СЭМ и ПЭМ-изображениях порошка Cu видно, что нанокластеры меди (размеры от 20 до 50 нм) обладают четко выраженным кристаллографическим гранями и ребрами.

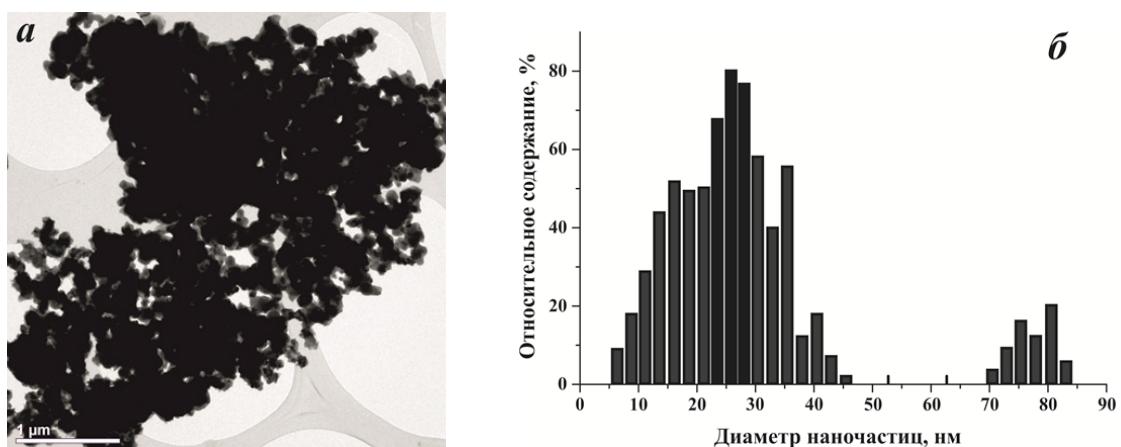
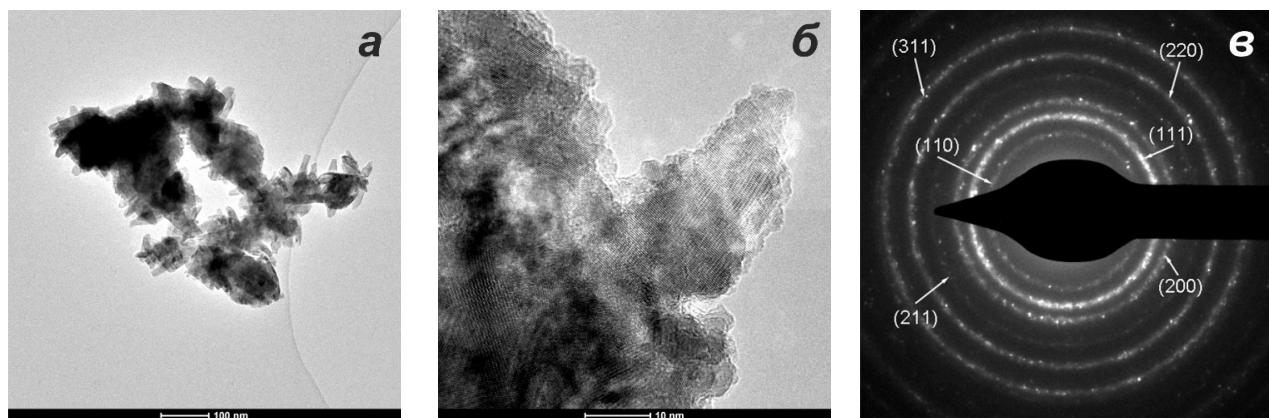


Рисунок 9 – ПЭМ-изображение НП меди (а) и гистограмма распределения по размерам (б)

Кроме того, вид многогранников нанокластеров меди не совсем идентичны простым формам роста кристаллов, характерных для кубической сингонии и точечной группе $m\bar{3}m$. Можно сказать, что это несколько искаженные (деформированные) простые формы соответствующие кристаллам с точечной группой $m\bar{3}m$. По-видимому, это объясняется сверхнеравновесными условиями получения порош-

ков. Это подтверждает и электроннограмма нанокластера меди, приведенная на рисунке 10в, где присутствуют запрещенные для ГЦК решетки и характерные для примитивной кубической решетки максимумы от плоскостей (110) и (211). Возможно, что искажение формы кристаллитов происходит за счет встраивания в структуру не типичной для меди сверхрешетки с примитивной решеткой.



**Рисунок 10 – ПЭМ-изображения (а), ПЭМ-изображение высокого разрешения (б)
и электроннограмма нанокластеров меди (в)**

Заключение

СЕМ исследования НП Ni показали, что размеры подавляющего числа частиц не превышает 100 нм. При этом наблюдается образование цепочечных структур из мелких частиц (от 10 до 30 нм), а так же частичное их спекание между собой (образуются так называемые шейки). Форма частиц Ni близка к сферической. Результаты ПЭМ исследований НП никеля согласуются с результатами, полученными с помощью СЭМ. Анализ данных ПЭМ подтвердил, что в образцах преобладают частицы диаметром 40-70 нм, средний диаметр которых равен 50 нм. Исследования порошка Fe методом СЭМ показали, что присутствует агломерация вокруг кластеров размерами от 100 до 200 нм металлических частиц с меньшими размерами (от 10 до 50 нм). При этом наблюдается образование цепочечных структур из мелких частиц (от 10 до

30 нм). Форма частиц Fe близка к сферической. В агломератах частицы с большим диаметром, как правило, коагулируют с более мелкими кластерами, это отражено нами в работе. Результаты ПЭМ исследований НП железа согласуются с результатами, полученными с помощью СЭМ. Из данных гистограммы распределения по размерам следует, что в образце преобладают частицы диаметром 40-70 нм, средний диаметр которых равен 65.5 нм. Результаты ПЭМ исследований НП меди согласуются с результатами, полученными с помощью СЭМ. В отличие от НП никеля и железа гистограмма распределения по размерам НП меди имеет бимодальное распределение. Средний диаметр частиц первой и второй фракции равен 23.6 и 81 нм, соответственно. СЭМ и ПЭМ-исследования НП Cu показали, что нанокластеры меди (размеры от 20 до 50 нм) обладают четко выраженным кристаллографическим граням и ребрами.

Литература

- 1 Lai W.T., Hwang C.J., Wang A.T., Yau J.C., Liao J.H., Chen L.H., Adachi K., Okamoto S. Etch uniformity control by gap and DC superposition at 65 nm metal hard-mask dual damascene // Proc. of the Intern. Symposium on Dry Process. Japan: Nagoya, Institute of Electrical Engineers. – 2006. – Vol. 6. – P.109-110.
- 2 Thieme M., Frenzel R., Schmidt S., Simon F., Henning A., Worch H., Lunkwitz K., Scharnweber D. Generation of Ultra hydrophobic Properties of Aluminium – A first Step to Self-cleaning Transparently Coated Metal Surfaces // Advanced engineering materials – 2001. – Vol. 3. – No. 9. – P. 691–695.
- 3 Shiratani M., Kawasaki H., Fukuzawa T., Yoshioka T., Ueda Y., Singh S. and Watanabe Y., Simultaneous in situ measurements of properties of particulates in RF silane plasmas using a polarization-sensitive laser-light-scattering method // J. Appl. Phys. – 1996. – Vol. 79. – P. 104–109.
- 4 Kersten H., Deutsch H., Stoffels E., Stoffels W. W., Kroesen G. M. W. and Hippler R. Micro disperse particles in plasmas: From disturbing side effects to new applications // Contrib. Plasma Phys. – 2001. – Vol. 41. – P. 598–609.
- 5 Shikha Jain, Niharika Nagar and Vijay Devra. Synthesis and characterization of highly efficient copper nanoparticles and their catalytic application in oxidative kinetic study // Advances in Applied Science Research – 2015. – Vol. 6(6). – P. 171–180.
- 6 Muhammad Imran Din & Rida Rehan. Synthesis, Characterization, and Applications of Copper Nanoparticles // Analytical Letters. – 2017. – Vol. 50. – No. 1. – P. 50–62.

7 Galletti A.M.R., Antonetti C., Marracci M., Piccinelli F. Tellini B. Novel microwavesynthesis of Cu nanoparticles in the absence of any stabilizing agent and their antibacterial and antistatic applications // Applied Surface Science. – 2013. – Vol. 280. – P. 610–618.

8 Mohammad J. Hajipour, Katharina M. Fromm, Ali Akbar Ashkarran, Dorleta Jimenez de Aberasturi, Idoia Ruiz de Larramendi, Teofilo Rojo, Vahid Serpooshan, Wolfgang J. Parak and Morteza Mahmoudi. Antibacterial properties of nanoparticles // Trends in Biotechnology. – 2012. – Vol. 30. – No. 10. – P. 499–511.

9 Linlin Wang, Chen Hu, Longquan Shao The antimicrobial activity of nanoparticles: present situation and prospects for the future // International Journal of Nanomedicine. – 2017. – Vol. 12. – P. 1227–1249.

10 Hosseini A. A., Allahyari M. and Daftari Besheli S. Synthesis of carbon nanotubes, nano fibbers and nano union by electric arc discharge method using NaCl accuse as solution and Fe and Ni particles and catalysts // International Journal of Science. Environment and Technology. –2012. –Vol.1. –P.217 – 229.

11 Yanjie Su, Hao Wei, Tongtong Li, Huijuan Geng, Yafei Zhang. Low-cost synthesis of single-walled carbon nanotubes by low-pressure air arc discharge // Materials Research Bulletin. –2014. –Vol. 50. –P.23–25.

12 Yanjie Su, Yaozhong Zhang, Hao Wei, Zhi Yang, Eric Siu-Wai Kong, Yafei Zhang. Diameter-control of single-walled carbon nanotubes produced by magnetic field-assisted arc discharge // Carbon. –2012. –Vol. 50. –P.2556 – 2562.

13 Борман В.Д., Борисюк П.В., Васильев О.С. и др. Наблюдение локализации электронов в шероховатых нанокластерах золота на поверхности графита // Письма в ЖЭТФ. – 2007. – Т. 86. – С.450-455.

14 Castro T., Reifenberger R., Choi E. et al. Size-dependent melting temperature of individual nanometer-sized metallic clusters // Phys. Rev. B. – 1990. – Vol. 42, No. 13. –P.8548–8556.

15 Barnard A.S., Young N.P., Kirkland A.I. et al. Nanogold: a quantitative phase map // ACS nano. – 2009. – Vol. 3. – P.1431–1436.

16 Buffat P., Borel J.P. Size effect on the melting temperature of gold particles // Phys. Rev. A. – 1976. – Vol. 13. – P.2287.

17 Kotov Yu.A., Electric Explosion of Wires as a Method for Preparation of Nanopowders // Journal of Nanoparticle Research. – 2003. –Vol. 5. Issue 5–6. –P. 539–550.

18 Yacaman M.J., Herrera R., Tehuacanero S. et al. Surface roughness studies in small particles using HREM // Ultramicroscopy. – 1990. – Vol. 33. – P.133-141.

19 Castro T., Reifenberger R., Choi E. et al. Size-dependent melting temperature of individual nanometer-sized metallic clusters // Phys. Rev. B. – 1990. – Vol. 42, No. 13. –P.8548–8556.

20 Partizan G., Yao Ma, Mansurov B.Z., Medyanova B.S., Xin Jiang, Aliyev B.A. SEM studies of carbon nanotubes synthesized on metal nanopowders // Proceedings of the Annual International World Conference on Carbon (Carbon 2014), Jeju island, Korea, June 29 – July 4, –2014. –POT2-01.

21 Buranbaev M.Zh., Partizan G., Aliev B.S., Entibekov Zh., Nakysbekov Zh. Radiation modification of the structure of nano-sized metal powders // Proceedings of the Future Information Communication Technology and Applications, Shenyang, China. – 2013.– Vol. 52. – P. 471-476.

22 Партизан Г., Мансуров Б.З., Медянова Б.С., Алиев Б.А., Xin Jiang, Синтез углеродныхnanoструктур на нанопорошках никеля, полученных методом электрического взрыва проводников // Инженерно-физический журнал (Journal of Engineering Physics and Thermophysics). – 2015. – Т. 88, № 6. –P. 1403-1408.

23 Partizan G., Mansurov B.Z., Medyanova B.S., Koshanova A.B., Aliyev B.A., Xin Jiang Synthesis of carbon nanostructures on iron nanopowders obtained by electric explosion of conductors // Eurasian Chemical-technological Journal, – 2015. – Vol. 17. – P. 201-207.

24 Ильин А.П. Развитие электровзрывной технологии получения нанопорошков в НИИ высоких напряжений при Томском политехническом университете // Известия ТПУ. –2003. –Т. 306, №1. – С. 133-139.

25 Nepijko S.A., Pippel E., Woltersdorf J. Dependence of lattice parameter on particle size // Physica status solidi (a). – 1980. – Vol. 61, № 2. – P. 469-475.

References

- 1 W.T. Lai, C.J. Hwang and et al., Proc. of the Intern. Symposium on Dry Process. Japan: Nagoya, Institute of Electrical Engineers, 6, 109-110 (2006).
- 2 M. Thieme, R. Frenzel and et al., Advanced engineering materials, 3 (9), 691–695 (2001).
- 3 M. Shiratani, H. Kawasaki and et al., J. Appl. Phys., 79, 104–109 (1996).
- 4 H. Kersten, H. Deutsch and et al., Contrib. Plasma Phys., 41, 598–609 (2001).
- 5 J. Shikha, N. Niharika and D. Vijay, Advances in Applied Science Research, 6(6), 171–180 (2005).
- 6 M. Imran Din & R. Rehan, Analytical Letters, 50 (1), 50–62 (2017).
- 7 A.M.R. Galletti, C. Antonetti and et al., Applied Surface Science, 280, 610–618 (2013).
- 8 M.J. Hajipour, K.M. Fromm and et al., Trends in Biotechnology, 30 (10), 499–511 (2013).
- 9 L. Wang, C. Hu, L. Shao, International Journal of Nanomedicine, 12, 1227–1249 (2017).
- 10 A.A. Hosseini, M. Allahyari and S. Daftari Besheli, International Journal of Science. Environment and Technology, 1, 217-229 (2012).
- 11 Su Yanjie, Wei Hao and et al., Materials Research Bulletin, 50, 23–25 (2014).
- 12 Su Yanjie, Zhang Yaozhong and et al., Carbon, 50, 2556 – 2562 (2012).
- 13 V.D. Borman, V.D. Vasiliev and et al., Pis'ma v ZHETF, 86, 450-455 (2007).

- 14 T. Castro, R. Reifenberger, E. Choi et al., Phys. Rev. B. 42(13), 8548–8556 (1990).
- 15 A.S. Barnard, N.P. Young, A.I. Kirkland et al., ACS nano, 3, 1431-1436 (2009).
- 16 P. Buffat, J.P. Borel, Phys. Rev. A., 13, 2284 (1976).
- 17 Yu.A. Kotov, Journal of Nanoparticle Research, 5-6, 539-550 (2003).
- 18 M.J. Yacaman, R. Herrera, S. Tehuacanero et al., Ultramicroscopy, 33, 133-141 (1990).
- 19 T. Castro, R. Reifenberger, E. Choi et al., Phys. Rev. B., 13, 8548–8556 (1990).
- 20 G. Partizan, B.Z. Mansurov and et al., Proceedings of the Annual International World Conference on Carbon, Jeju island, Korea, June 29 – July 4, POT2-01 (2014).
- 21 M.Zh. Buranbaev, G. Partizan and et al., Proceedings of the Future Information Communication Technology and Applications, Shenyang, China, 52, 471-476 (2013).
- 22 G. Partizan, B.Z. Mansurov and et al., Inzhenerno-physicheski jurnal, 6, 1403-1408 (2015) (in Russ).
- 23 G. Partizan, B.Z. Mansurov and et al., Eurasian Chemical-technological Journal, 17, 201-207 (2015).
- 24 A.P. Iliyn, Izvestya TPU, 306(1), 133-139 (2003) (in Russ).
- 25 S.A. Nepijko, E. Pippl, Physica status solidi (a), 2, 469-475 (1980).

Ерланулы Е.¹, Батрышев Д.Г.¹, Хори Масару²

¹Лаборатория инженерного профиля,
Казахский национальный университет имени аль-Фараби,
Казахстан, г. Алматы, e-mail: yerlanuly@physics.kz
²Нагойский университет, Япония, г. Ногая

**СИНТЕЗ УГЛЕРОДНЫХ НАНОСТЕН
МЕТОДОМ ХИМИЧЕСКОГО ОСАЖДЕНИЯ
ИЗ ГАЗОВОЙ ФАЗЫ
В ПЛАЗМЕ ВЫСОКОЧАСТОТНОГО РАЗРЯДА**

Работа посвящена синтезу углеродных наностен (УНС) методом химического осаждения из газовой фазы в плазме высокочастотного (ВЧ) разряда при различных значениях мощности ВЧ разряда и исследованию их свойств. В результате проведенных исследований был определен оптимальный параметр мощности ВЧ разряда для роста УНС с совершенной структурой. Установлено, что дальнейшее увеличение мощности ведет к агломерации зародышей УНС и образованию нанокластеров и многослойной графеной структуры, об этом свидетельствуют микроскопический анализ образцов. Морфология и структура УНС были исследованы с помощью сканирующей электронной микроскопии Quanta 3D 200i (SEM, FEI company, USA) и спектроскопии комбинационного рассеяния света Ntegra SPECTRA. Установлено, что в механизме формирования УНС ионное облучение Ar играет важную роль. Облучение ионами Ar усиливает поверхностную реакцию в фазе роста, включая адсорбцию углеводородных радикалов на оборванных связях (дефектах), в то время как увеличение ионного облучения (увеличение ВЧ мощности) препятствует дальнейшему вертикальному росту углеродных наностен из-за эффектов травления. Данное явление объясняется появлением агломерированных УНС с увеличением мощности разряда.

Ключевые слова: углеродные наностены, химическое осаждение из газовой фазы в плазме, высокочастотный разряд, спектр комбинационного рассеяния света.

Yerlanuly Ye.¹, Batryshev D.G.¹, Hori M.²

¹Laboratory of engineering profile, Al-Farabi Kazakh National University,
Kazakhstan, Almaty, e-mail: yerlanuly@physics.kz
²Nagoya University, Nogai, Japan

**Synthesis of carbon nanowalls by the method
of plasma enhanced chemical vapor deposition
in a radio-frequency discharge plasma**

The work is devoted to the synthesis of carbon nanowalls (CNWs) by the method of plasma enhanced chemical vapor deposition in a radio-frequency (RF) discharge plasma at various values of RF discharge power and the study of their properties. As a result of the study, the optimum power parameter for growth of CNWs with perfect structure was determined. It has been established that a further increase in power leads to the agglomeration of nuclei of the CNWs and the formation of nanoclusters and a multilayer graphene structure, which is evidenced by the microscopic analysis of the samples. The morphology and structure of the CNWs were studied by using a Quanta 3D 200i scanning electron microscopy (SEM, the FEI company, USA) and Ntegra SPECTRA Raman spectroscopy. It has been established that the ion irradiation of Ar plays an important role in the mechanism of the formation of the CNWs. Irradiation

with Ar ions enhances the surface reaction in the growth phase, including the adsorption of hydrocarbon radicals on dangling bonds (defects), while an increase in ion irradiation (increase in RF power) impedes further vertical growth of carbon nanostructures due to the etching effects. This phenomenon explains the emergence of agglomerated CNWs with increasing discharge power.

Key words: carbon nanowalls, plasma enhanced chemical vapor deposition, radio-frequency discharge, Raman spectrum.

Ерланулы Е.¹, Батрышев Д.Ф.¹, Хори Масару²

¹Инженерлік бейіндегі зертхана, әл-Фараби атындағы Қазак ұлттық университеті, Қазақстан, Алматы к., e-mail: yerlanuly@physics.kz

²Нагой университеті, Жапония, Ногая к.

**Жоғары жиілікті разрядта газдық фазадан
плазмохимиялық әдісімен
көміртек наноқабырғыларын синтездеу**

Жұмыс әртүрлі құаттағы жоғары жиілікті сыйымдылықты разрядта газдық фазадан плазмохимиялық әдісімен көміртекті наноқабырғаларды (КНҚ) синтездеуге және олардың қасиеттерін зерттеу тақырыбына арналған. Жүргізілген зерттеу нәтижесінде КНҚ синтезінің оптимальды қуат параметрі анықталды. Қуат шамасы бұл көрсеткіштен жоғары болған жағдайда КНҚ агломирацияланып нанокластерлер және көп қабатты графен түзеді. Алынған КНҚ морфологиясы және құрылымы Quanta 3D 200i (SEM, FEI company, USA) электронды сканирлеуші микроскопия және Рамандық Ntegra SPECTRA спектроскопиясы көмегімен саралтама негізінде зерттелді. КНҚ қалыптасуында беттің аргон иондарының сәулеленуі нәтижесінде фазалық өсу мен көмірсутек радикалдарының адсорбациялануына алып келеді, ал иондық сәулеленудің шамадан тыс болуы (ЖЖ разрядтың қуатының артуы) шөгіндіру әсері нәтижесінде КНҚ өсуіне кедері келтіреді. Аталған құбылыс қуат шамасының өсуімен қалыптасқан агломирацияланған КНҚ пайда болуын түсіндіреді.

Түйін сөздер: көміртекті наноқабырға, плазмада химиялық буды тұндыру, жоғары жиілікті разряд, Раман спектрі.

Введение

Углеродные наностены представляют собой двухмерный материал с вертикально ориентированными графеновыми листами. Форма УНС подобна лабиринтной структуре с толщиной слоев порядка несколько нанометров. УНС впервые были получены в 2002 году профессором Y. Wu и др. [1] методом химического осаждения углерода в микроволновой плазме (MPECVD). Было предсказано, что такая структура из-за развитой поверхности может быть использована для изготовления дисплеев с полевой эмиссией [2-4], электродных катализаторов [5], накопителей энергии [6-8], датчиков [9] и т.д. Такой большой интерес ученых к УНС связан с ее «стеноподобной» структурой с высоким соотношением площади поверхности к объему, к тому же процесс получения УНИ является довольно распространенным [9-17]. Синтез УНС, как правило, осуществляется методом химического осаждения из газовой фазы в усиленной плазме (plasma enhanced chemical vapor deposition – PECVD) при относительной высокой температуре рабочего газа порядка 500-900 °C, но известны работы, которые использовали более низкие значения тем-

пературы для синтеза УНС на подложках кремния, оксидов и металлов [9-22]. В.А. Кривченко и др. в своей работе [23] показали, что УНС могут быть использованы в качестве материала подобному черному телу, обладающему минимальный коэффициент отражения 0,13%, где основным фактором оптических характеристик является структурное несовершенство, т.е. наличие краевых состояний и развитой поверхности. Таким образом, получение УНС с заданными характеристиками является интересной задачей для их практического применения.

Существует много работ [1-23], посвященных изучению процессов влияния параметров синтеза на рост УНС. В работе Y.X. Liu и др. [16] показана зависимость увеличения плотности углеродных наноструктур с увеличением давления газа от 120 до 300 Па, кроме того в процессе синтеза формирование радикалов углерода возрастает с увеличением мощности разряда от 600 до 2400 Вт, а большие значения мощности разряда разрушают поверхность углеродных наностен благодаря усилинию плазменного травления. В работе H.J. Cho и др. [20] показаны результаты получения УНС с высокими электрическими характеристиками при значениях мощности раз-

ряда 200-400 Вт. Профессор M. Hiramatsu и др. продемонстрировали [24] синтез УНС с использованием метода RF-PECVD при мощности ВЧ 100-400 Вт. Было обнаружено, что в случае использования газовой системы C_2F_6/H_2 осаждение УНС осуществляется лучше, чем в случае CH_4/H_2 . Таким образом, во всех работах в процессе синтеза используют значения мощности разряда минимум 100 Вт, где электродная система и объемы камеры сравнительно идентичны. В настоящей работе мы предлагаем метод синтеза УНС на кремниевой подложке с никелевым катализатором в плазме ВЧ разряда при относительно низких значениях ВЧ мощности с примерным сохранением геометрических размеров камеры и системы электродов для недорогого изготовления УНС.

Эксперимент и результаты

PECVD-синтез углеродных наноматериалов, в частности углеродных наностен на кремниевой (Si) пластине с тонким нанослойем никелевого (Ni) катализатора проводился в RF-PECVD реакторе, состоящий из двух параллельных ВЧ электродов с нагревателем под нижним заземленным ВЧ электродом. Подложка Si/Ni была приготовлена методом электронно-лучевого осаждения. Более подробное описание экспериментальной установки представлено в работе [25].

Предварительно перед синтезом УНС подложку Si/Ni подвергали мягкой термической и плазменной обработке в среде аргона для очистки поверхности от загрязнения и формирования наноструктур Ni при параметрах разряда: температура 300-350°C, скорость потока аргона 7 см³/мин (стандартный кубический сантиметр в минуту), давление 1,3 Тор и мощность ВЧ разряда 9-15 Вт. Далее после 15 минутной мягкой обработки подложку температуру повышают до 500°C и в камеру напускают источник углерода метан (CH_4) со скоростью потока 0,8 см³/мин, давление при этом увеличивается до 1,8-2 Тор, а время синтеза выдерживают 25 минут.

Полученные образцы в результате экспериментальных работ были исследованы с помощью сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) и спектроскопией комбинационного рассеяния света (КРС) для оценки их морфологии и структурных характеристик.

На рисунке 1 представлен типичный КРС спектр УНС, синтезированный при температуре 500 °C, потоке Ar/ CH_4 газов 7/0,8 см³/мин и ВЧ – мощности 10 Вт. Как видно, спектр со-

стоит из D-пика при 1361 см⁻¹, G-пика при 1583 см⁻¹ с D'-пиком при 1618 см⁻¹, 2D-пика при 2721 см⁻¹ и G + D-пика при 2955 см⁻¹. Колебательная D-мода связана с дефектами в структурах с sp^2 -гибридизацией, G-мода соответствует графитоподобным материалам, D'-пик характеризует появление краевых границ графена и нарушение симметрии конечного размера кристалла, 2D-пик (G') является второй гармоникой D-моды и пик G+D (D'') представляет собой комбинацию пиков G и D. Соответствующие СЭМ изображение данного образца представлено на рисунке 2.

Соотношения интенсивностей пиков D и G (I_D/I_G), а также 2D и G (I_{2D}/I_G) указывают на степень дефектности кристалла, и характеризует совершенство графеновой структуры [26]. Зависимости I_D/I_G и I_{2D}/I_G от мощности ВЧ разряда УНС показаны на рисунке 3. Графики показывают, что качество структуры синтезированных УНС увеличивается с увеличением мощности ВЧ разряда, а при значениях мощности разряда 13Вт и выше ухудшается. Более того, увеличение мощности разряда приводит к усилиению аргоновой бомбардировки поверхности синтезируемого продукта, т.е. плазменному травлению, при этом рост УНС прекращается, но появляются дефекты в структуре, которые являются основой для новых зародышей УНС. Таким образом, увеличение мощности ВЧ разряда препятствует вертикальному росту УНС с образованием стен, но способствует росту УНС в радиальном направлении, что ведет к образованию наноструктуры подобной многослойному графеновому материалу. Подобная структура представлена на рисунке 4.

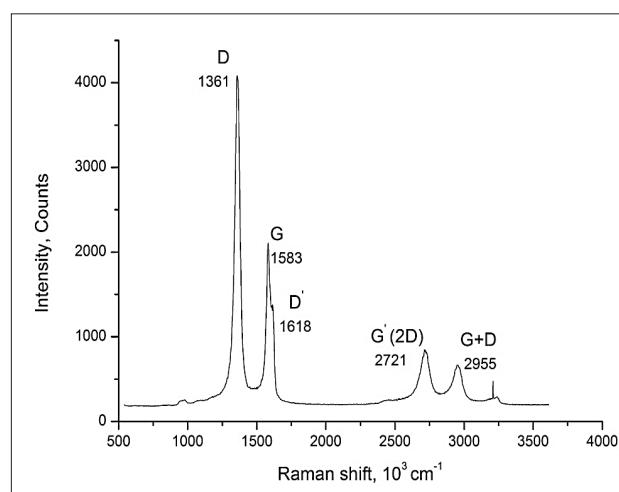


Рисунок 1 – КРС спектр УНС

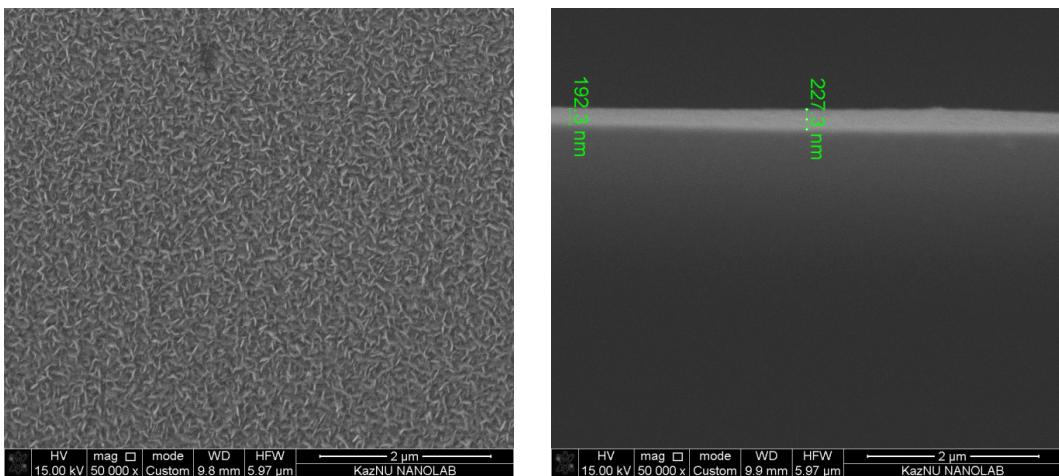


Рисунок 2 – СЭМ изображения УНС

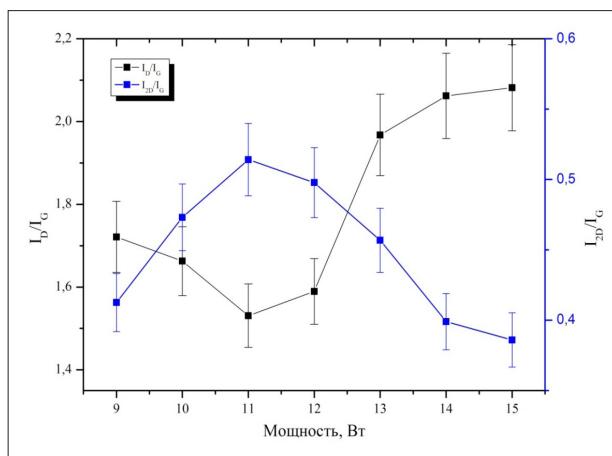
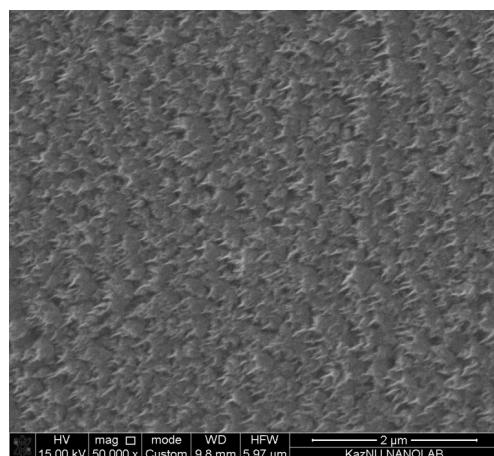


Рисунок 3 – Зависимость качества структуры УНС от мощности ВЧ разряда

Рисунок 4 – СЭМ изображения полученного наноматериала в Ar/CH₄ плазме ВЧ-разряда при температуре 500 °C, потоке Ar/CH₄ газов 7/0,8 см³/мин и ВЧмощности 14 Вт

Таким образом, было установлено, что оптимальным значением мощности ВЧ разряда для роста УНС является 10-12 Вт. Установлено, что в механизме формирования УНС ионное облучение Ar играет важную роль [26-27]. Облучение ионами Ar усиливает поверхностную реакцию в фазе роста, включая адсорбцию углеродородных радикалов на оборванных связях (дефектах), в то время как увеличение ионного облучения (увеличение ВЧ мощности) препятствует дальнейшему вертикальному росту углеродных наностен из-за эффектов травления. Данное явление объясняет появлением агломерированных УНС с увеличением мощности разряда.

Вывод

В данной работе был рассмотрен синтез углеродных наностен методом химического осаждения из газовой фазы в плазме высокочастотного емкостного разряда. Определены оптимальные параметры разряда для синтеза качественных УНС. Обнаружено, что увеличение мощности приводит к травлению поверхности синтезируемого продукта и ведет к агломерации зародышей УНС, вследствие которого образуются углеродные нанокластеры и многослойные графеновые структуры.

Литература

- 1 Wu Y., Qiao P., Chong T., Shen Z., Carbon Nanowalls Grown by Microwave Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition // *Adv. Mater.* – 2002. – Vol.14. – P.64-67.
- 2 Takeuchi W., Kondo H., Obayashi T., Hiramatsu M., Hori M. Electron field emission enhancement of carbon nanowalls by plasma surface nitridation // *Applied Physics Letters*. – 2011. – Vol.98, No. 12. – P.123107.
- 3 Stratakis E., Giorgi R., Barberoglou M., Dikimonos Th., Salernitano E., Lisi N., Kymakis E. Three-dimensional carbon nanowall field emission arrays // *Appl. Phys. Lett.* – 2010. – Vol. 96. – 043110.
- 4 Shimada S., Teii K., Nakashima M. Low threshold field emission from nitrogen-incorporated carbon nanowalls // *Diamond and Related Materials*. – 2010. – Vol. 19, No 7-9. – P.956-959.
- 5 Shin S.Ch., Yoshimura A., Matsuo T., Mori M., Tanimura M., Ishihara A., Ota K., Tachibana M. Carbon nanowalls as platinum support for fuel cells // *Journal of Applied Physics*. – 2011. – Vol.110. – 104308.
- 6 Ghosh S., Sahoo G., Polaki S.R., Krishna N.G., Kamruddin M., Mathews T. Enhanced supercapacitance of activated vertical graphene nanosheets in hybrid electrolyte // *Journal of Applied Physics*. – 2017. – Vol. 122. – 214902.
- 7 Wang K., Wang N., He J., Yang Z., Shen X., Huang Ch., Graphdiyne Nanowalls as Anode for Lithium—Ion Batteries and Capacitors Exhibit Superior Cyclic Stability// *ElectrochimicaActa*. – 2017. – Vol. 253. – P.506–516.
- 8 Chi Y.W., Hu Ch.Ch., Shen H.H., Huang K.P., New Approach for High-Voltage Electrical Double-Layer Capacitors Using Vertical Graphene Nanowalls with and without Nitrogen Doping // *Nano Lett.* 2016. – Vol.16, No 9. P.5719–5727.
- 9 Tomatsu M., Hiramatsu M., Foord J.S., Kondo H., Ishikawa K., Sekine M., Takeda K., Hori M., Hydrogen peroxide sensor based on carbon nanowalls grown by plasma-enhanced chemical vapor deposition // *Japanese Journal of Applied Physics*. 2017. Vol. 56, No 6S2. 06HF03.
- 10 Yen H.F., Horng Y.Y., Vertically aligned epitaxial graphene nanowalls with dominated nitrogen doping for superior supercapacitors // *Carbon*. 2017. Vol. 82. P.124-134.
- 11 Vizireanu S., Nistor L., Haupt M., Katzenmaier V., Oehr Ch., Dinescu G., Carbon Nanowalls Growth by Radiofrequency Plasma-Beam-Enhanced Chemical Vapor Deposition, // *Plasma Process. Polym.* 2008. Vol. 5, No 3. P. 263–268.
- 12 Tzeng Y., Chen W.L., Wu Ch., Lo J.Y., Li Ch.Y, The synthesis of graphene nanowalls on a diamond film on a silicon substrate by direct-current plasma chemical vapor deposition, // *Carbon*. 2013. – Vol. 53. P. 120-129.
- 13 Terasawa T., Saiki K., Growth of graphene on Cu by plasma enhanced chemical vapor deposition, // *Carbon*. 2012. Vol. 50. P.869-874.
- 14 Mozetic M., Vesel A., Stoica S.D., Vizireanu S., Dinescu G., Zaplotnik R., Oxygen atom loss coefficient of carbon nanowalls, // *Applied Surface Science*. 2015. – Vol. 333. P.207–213.
- 15 Mori Sh., Ueno T., Suzuki M., Synthesis of carbon nanowalls by plasma-enhanced chemical vapor deposition in a CO/H₂ microwave discharge system // *Diamond and Related Materials*. 2011. Vol. 20, No8. –P.1129–1132.
- 16 Liu Y.X., Liu J.H., Zhu C.C., Liu W.H., Effects of gas pressure and plasma power on the growth of carbon nanostructures, // *Applied Surface Science*. 2010. Vol. 256. –P. 1996–1999.
- 17 Lehmann K., Yurchenko O., Heilemann A., Vierrath S., Zielke L., High surface hierarchical carbon nanowalls synthesized by plasma deposition using an aromatic precursor, // *Carbon*, 2017. Vol.118. P.578-587.
- 18 Hassan S., Suzuki M., Mori Sh., El-Moneim A.A., MnO₂/carbon nanowalls composite electrode for supercapacitor application, // *Journal of Power Sources*. 2014. Vol. 249. P. 21-27.
- 19 Cui L., Chen J., Yang B., Sun D., Jiao T., RF-PECVD synthesis of carbon nanowalls and their field emission properties, // *Applied Surface Science*. 2015. Vol. 357. P. 1-7.
- 20 Cho H.J., Kondo H., Ishikawa K., Sekine M., Hiramatsu M., Hori M., Density control of carbon nanowalls grown by CH₄/H₂ plasma and their electrical properties, // *Carbon*. 2014. Vol.68. –P 380-388.
- 21 Wu Y., Effects of Localized Electric Field on the Growth of Carbon Nanowalls, // *NanoLetters*. 2002. Vol. 2, No 4. P.355-359.
- 22 Nair J.RRius., G., Jagadale P., Destro M., Tortello M., Yoshimura M., Tagliaferro A., Gerbaldi C., Remarkably stable high power Li-ion battery anodes based on vertically arranged multilayered-graphene, // *ElectrochimicaActa*. 2015 Vol. 182. –P.500–506.
- 23 Krivchenko V.A., Evlashin S.A., Mironovich K.V., Verbitskiy N.I., Nefedov A., Woll C., Kozmenkova A.Ya., Suetin N.V., Svyakhovskiy S.E., Vyalikh D.V., Rakhimov A.T., Egorov A.V., Yashina L.V., Carbon nanowalls: the next step for physical manifestation of the black body coating // *Scientific Reports*. 2013. Vol. 3. P. 3328.
- 24 Hiramatsu M., Shiji K., Amano H., Hori M., Fabrication of vertically aligned carbon nanowalls using capacitively coupled plasma-enhanced chemical vapor deposition assisted by hydrogen radical injection // *App.Phys.Lett.* 2004 Vol. 84, No 23. P. 4708-4710.
- 25 Batryshev D.G, Yerlanuly Ye., Ramazanov T.S., Dosbolayev M.K., Gabdullin M.T., Elaboration of carbon nanowalls using radio frequency plasma enhanced chemical vapor deposition // *J. Materials Today: Proceedings* 2018. Vol.5, No11. –P. 22764–22769.
- 26 Kondo Sh., Kondo H., Hiramatsu M., Sekine M., Hori M., Critical factors for nucleation and vertical growth of two dimensional nano-graphene sheets employing a novel Ar+beam with hydrogen and fluorocarbon radical injection // *J. Appl. Phys. Exp.* 2010. Vol. 3. P. 045102-3.
- 27 Hori M., Kondoand H., Hiramatsu M. Radical-controlled plasma processing for nanofabrication // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2011. Vol. 44. P. 174027-15.

References

- 1 Y.Wu, P. Qiao, T. Chong, Z. Shen, *Adv. Mater.*, 14, 64-67 (2002).
- 2 W. Takeuchi, H. Kondo, T. Obayashi, M. Hiramatsu, M. Hori, *Applied Physics Letters*, 98, 12, 123107 (2011).
- 3 E. Stratakis, R. Giorgi, M. Barberoglou, Th. Dikonimos, E. Salernitano, N. Lisi, E. Kymakis, *Appl. Phys. Lett.*, 96, 043110 (2010).
- 4 S. Shimada, K. Teii, M. Nakashima, *Diamond and Related Materials*, 19, 7-9, 956-959 (2010).
- 5 S.Ch. Shin, A. Yoshimura, T. Matsuo, M. Mori, M. Tanimura, A. Ishihara, K. Ota, M. Tachibana, *Journal of Applied Physics*, 110, 104308 (2011).
- 6 S. Ghosh, G. Sahoo, S.R. Polaki, N.G. Krishna, M. Kamruddin, T. Mathews, *Journal of Applied Physics*, 122, 214902 (2017).
- 7 K. Wang, N. Wang, J. He, Z. Yang, X. Shen, Ch. Huang, *Electrochimica Acta*, 253, 506–516 (2017).
- 8 Y.W. Chi, Ch.Ch. Hu, H.H. Shen, K.P. Huang, *Nano Lett.*, 16, 9, 5719–5727 (2016).
- 9 M. Tomatsu, M. Hiramatsu, J.S. Foord, H. Kondo, K. Ishikawa, M. Sekine, K. Takeda, M. Hori, *Japanese Journal of Applied Physics*, 56, 06HF03 (2017).
- 10 H.F. Yen, Y.Y. Horng, et al., *Carbon*, 82, 124-134 (2015).
- 11 S. Vizireanu, L. Nistor, M. Haupt, V. Katzenmaier, Ch. Oehr, G. Dinescu, *Plasma Process. Polym.*, 5, 263–268 (2008).
- 12 Y. Tzeng, W.L. Chen, Ch. Wu, J.Y. Lo, Ch.Y. Li, *Carbon*, 53, 120-129 (2013).
- 13 T. Terasawa, K. Saiki, *Carbon*, 50, 869-874 (2012).
- 14 M. Mozetic, A. Vesel, S.D. Stoica, S. Vizireanu, G. Dinescu, R. Zaplotnik, *Applied Surface Science*, 333, 207–213 (2015).
- 15 Sh. Mori, T. Ueno, M. Suzuki, *Diamond and Related Materials*, 20 1129–1132 (2011).
- 16 Y.X. Liu, J.H. Liu, C.C. Zhu, W.H. Liu, *Applied Surface Science*, 256, 1996–1999 (2010).
- 17 K. Lehmann, O. Yurchenko, A. Heilemann, S. Vierrath, L. Zielke, S. Carbon, 118, 578-587 (2017).
- 18 S. Hassan, M. Suzuki, Sh. Mori, A.A. El-Moneim, *Journal of Power Sources*, 249, 21-27 (2014).
- 19 L. Cui, J. Chen, B. Yang, D. Sun, T. Jiao, *Applied Surface Science*, 357, 1-7 (2015).
- 20 H.J. Cho, H. Kondo, K. Ishikawa, M. Sekine, M. Hiramatsu, M. Hori, *Carbon*, 68, 380-388 (2014).
- 21 Y. Wu, *NanoLetters*, 2, 4, 355-359 (2002).
- 22 J.R. Nair, G. Rius, P. Jagadale, M. Destro, M. Tortello, M. Yoshimura, A. Tagliaferro, C. Gerbaldi, *Electrochimica Acta*, 182, 500–506 (2015).
- 23 V.A. Krivchenko, S.A. Evlashin, K.V. Mironovich, N.I. Verbitskiy, A. Nefedov, C. Woll, A.Ya. Kozmenkova, N.V. Suetin, S.E. Svyakhovskiy, D.V. Vyalikh, A.T. Rakhimov, A.V. Egorov, L.V. Yashina, *Scientific Reports*, 3, 3328 (2013).
- 24 M. Hiramatsu, K. Shiji, H. Amano, M. Hori, *App.Phys.Lett.*, 84, 23, 4708-4710 (2004).
- 25 D.G. Batryshev, Ye. Yerlanuly, T.S. Ramazanov, M.K. Dosbolayev, M.T. Gabdullin, *J. Materials Today: Proceedings* 5, 22764–22769 (2018).
- 26 Sh. Kondo, H. Kondo, M. Hiramatsu, M. Sekine and M. Hori, *J. Appl. Phys. Exp.*, 3, 045102-3 (2010).
- 27 M. Hori, H. Kondo and M. Hiramatsu, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 44, 174027-15, (2011).

Myasnikova L.N.¹, Istlyau A.S.¹, Sergeyev D.M.^{1,2}

¹Zhubanov Aktobe Regional State University,
Kazakhstan, Aktobe, e-mail: myasnikova_ln@mail.ru
²Begeldinov Military Institute of Air Defence Forces,
Kazakhstan, Aktobe

COMPUTER SIMULATION OF THE DENSITY OF THE STATE OF THE NAF NANOCRYSTAL

At present, various theoretical research methods are intensively used to interpret experimental results related to the study of the properties of defects in solids. Progress in this direction is possible thanks to the improvement of computer technology and the development of modern quantum chemical packages. The paper presents the results of computer simulation of the density of states and the total energy of an ideal NaF nanocrystal ($\text{Na}_{13}\text{F}_{14}$, Na_4F_5 , $\text{Na}_{22}\text{F}_{23}$) and with the simplest point defects in various cluster compounds ($\text{Na}_{12}\text{F}_{13}$, $\text{Na}_{21}\text{F}_{22}$). Simulation of characteristics is implemented in the Atomistix ToolKit with Virtual NanoLab program in GGA (generalized gradient approximation) functionality. Objects studied are quantum dots. The results obtained may be useful in the study of nanocrystals.

Key word: NaF nanocrystal, density of states, band structure, total energy, computer simulation.

Мясникова Л.Н.¹, Истляуп А.С.¹, СергеевД.М.^{1,2}

¹К. Жұбанов атындағы Ақтөбе өнірлік мемлекеттік университеті,
Қазақстан, Ақтөбе қ., е-mail: myasnikova_ln@mail.ru
²Т. Бигельдинов атындағы Әуе қорғанысы қүштерінің Әскери институты,
Қазақстан, Ақтөбе қ.

NaF нанокристалдың күй тығыздығының компьютерлік модельдеу

Қазіргі кезде қатты денелердегі ақаулардың қасиеттерін зерттеуге байланысты эксперименталды нәтижелерді түсіндіру үшін түрлі теориялық зерттеулер әдісі белсенді қолданылады. Бұл бағыттағы прогресс компьютерлік технологияны жетілдіру және заманауи кванттық химиялық жыныстықтарды әзірлеу ақауасында мүмкін болады. Берілген жұмыста NaF ($\text{Na}_{13}\text{F}_{14}$, Na_4F_5 , $\text{Na}_{22}\text{F}_{23}$) идеал нанокристалы мен қаралайым нүктелік ақаулары бар түрлі кластерлік қосылыстардың ($\text{Na}_{12}\text{F}_{13}$, $\text{Na}_{21}\text{F}_{22}$) күй тығыздығы мен толық энергиясының компьютерлік модельдеуі көрсетілген. Сипаттамалардың модельденуі Atomistix ToolKit with Virtual NanoLab бағдарламасы негізінде GGA (generalized gradient approximation) функционалдылығында жүзеге асырылды. Зерттелген объектілер кванттық нүктелерге жатқызылады. Алынған нәтижелерді нанокристалдарды зерттеуде пайдалы болуы мүмкін.

Түйін сөздер: NaF нанокристалы, күй тығыздығы, зоналық құрылыш, толық энергия, компьютерлік модельдеу.

Мясникова Л.Н.¹, Истляуп А.С.¹, СергеевД.М.^{1,2}

¹Академический региональный государственный университет им. К. Жубанова,
Казахстан, г. Актобе, e-mail: myasnikova_ln@mail.ru

²Военный институт Сил воздушной обороны им. Т.Я. Бегельдинова,
Казахстан, г. Актобе

Компьютерное моделирование плотности состояния нанокристалла NaF

В настоящее время интенсивно применяются различные теоретические методы исследования для интерпретации экспериментальных результатов, связанных с изучением свойств дефектов в твердых телах. Прогресс в этом направлении возможен благодаря совершенствованию компьютерных технологий и разработке современных квантово-химических пакетов. В работе представлены результаты компьютерного моделирования плотности состояний и полной энергии идеального нанокристалла NaF ($\text{Na}_{13}\text{F}_{14}$, Na_4F_5 , $\text{Na}_{22}\text{F}_{23}$) и с простейшими точечными дефектами в различных кластерных соединениях ($\text{Na}_{12}\text{F}_{13}$, $\text{Na}_{21}\text{F}_{22}$). Моделирование характеристик реализовано в программе Atomistix ToolKit with Virtual NanoLab в функциональности GGA (generalized gradient approximation). Исследуемые объекты относятся к квантовым точкам. Полученные результаты могут быть полезными при исследовании нанокристаллов.

Ключевые слова: нанокристалл NaF, плотность состояний, зонная структура, полная энергия, компьютерное моделирование.

Introduction

Currently, the properties of alkali halide nanocrystals are of great technological interest on the part of specialists in chemistry, physics, and also engineers [1-7]. In [8], the results on adhesion, bonding and construction, surface electron states and other subtle effects in nano-lattices were demonstrated. The processes of demetallization of alkali halide clusters by shock-induced fragmentation of cubic $\text{Na}_{14}\text{F}_{12}$ are discussed in detail in [9]. The reactions arising during collisions of NaF clusters with the silicon surface were investigated in [10]. The X-ray diffraction study of NaF nanocrystals in a photo-refractory glass is described in detail in [11]. In [12-15], the structural, electronic, dynamic, and thermodynamic properties of alkali metal halides were calculated from first principles using both full-potential and plane wave pseudopotential methods. The use of various effects, such as deformation, allows us to consider the new possibilities of using alkaline halide dosimetry crystals [16-18].

It is believed that nanostructured objects include such objects, the characteristic dimensions of which lie in the range from 1 to 100 nm. In general, this dimensional limit is somewhat conditional. The main feature of nanoobjects is that, because of their smallness, they exhibit special properties [19]. Since in nanocrystalline structures the main part of ions lies in the outer layer, many of their properties are revealed on their surface. In many cases, these special properties can manifest

themselves even when the size of nanoobjects exceeds the conventionally set limit of 100 nm. In [20], the energy of a $2\times 2\times 2$ cubic cell of a NaF crystal was calculated using the Hartree-Fock method.

A deep understanding of the optical properties of solids is impossible without a detailed knowledge of their energy electronic structure. Electronic processes in ionic crystals are considered on the basis of an approximate quantum-mechanical theory developed by Bloch, Wilson, and others, called the band theory. In the band theory, the motion of electrons and nuclei is divided within the framework of the Born-Oppenheimer adiabatic approximation.

One of the characteristics of the reflecting property of a nano-object is the electron density of states, which is an important parameter in statistical and solid state physics [21], which determines the number of energy levels in the energy interval per unit volume or area.

In this paper, an attempt was made using computer simulation using Atomistix ToolKit with Virtual NanoLab to determine the density of states, the total energy and the band structure of a NaF crystal in various “negative” cluster compounds ($\text{Na}_{13}\text{F}_{14}$, $\text{Na}_{12}\text{F}_{13}$, Na_4F_5 , $\text{Na}_{22}\text{F}_{23}$, $\text{Na}_{21}\text{F}_{22}$) at 1 K.

Description of the object and methods of research

Isolated alkali metal atoms Na and F halide have the following electronic configuration: $\text{Na}^0 -$

$1s^22s^22p^63s^1$, $F^0 - 1s^22s^22p^5$. In the NaF matrix, the ions of the corresponding elements take on the following electron configuration – $\text{Na}^+ - 1s^22s^22p^6$, $\text{F}^- - 1s^22s^22p^6$. As a result, the valence electron located on the outer shell of Na^0 completely goes to F^0 .

The $\text{Na}_{13}\text{F}_{14}$ cluster contains 27 ions, as shown in Figure 1a, is a negatively charged cube with indices $(j, k, i) = (3, 3, 3)$ and with O_h symmetry. The $\text{Na}_{12}\text{F}_{13}$ cluster is obtained by removing the

Na^+ and F^- ions from the central region of the nanoobject (Figure 1b). The Na_4F_5 object contains 9 ions, as shown in Figure 1c, is a plane with indices $(j, k, i) = (3, 3, 1)$. The $\text{Na}_{22}\text{F}_{23}$ cluster is a parallelepiped with indices $(j, k, i) = (3, 3, 5)$, containing 45 ions (Figure 1d). The $\text{Na}_{21}\text{F}_{22}$ nano-object, shown in Figure 1f, was obtained by removing Na^+ and F^- ions from the center of the penultimate layer [7]. The distance between the centers of the nearest ions in NaF is 2.31\AA [22-23].

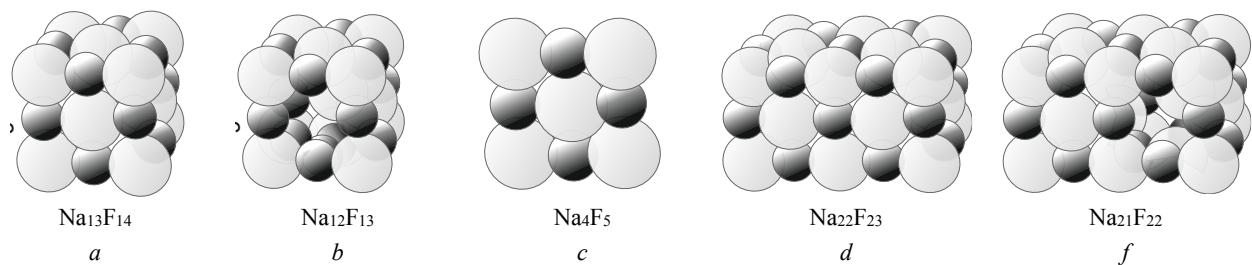


Figure 1 – The geometry of NaF clusters

In the adiabatic approximation, the solution of the Schrödinger equation shows that the states of an excess electron in a crystal with a periodic field are described by the Bloch wave functions

$$u_k(\vec{r}) \exp \left\{ -i \left(\frac{E}{\hbar} t - \vec{k} \cdot \vec{r} \right) \right\},$$

where the function $u_k(\vec{r})$ has translational lattice symmetry, E is energy, \vec{k} is the wave vector. For a face-centered alkali halide crystal, the first Brillouin zone is a fourteen-shaped truncated octahedron shape; six faces have the form of squares, eight – the form of regular hexagons. The Γ -point lies at the center of the first Brillouin zone ($k = 0$), the X-point lies at the center of the square plane, the L-point is at

the center of the hexagon. Along the [100] axis, the wave vector value varies from 0 to k_x , along the [111] direction from 0 to k_L . In all alkali halide crystals, the maximum of the valence band and the minimum of the conduction band are located in the center of the Brillouin zone (point Γ). The upper hole zones are formed from the p -states of the halogen and have a negative dispersion typical of the p -zones. The bottom of the conduction band is s -character, the effective electron mass is isotropic and has a value of the order of $(0.5-1)m_0$.

Computer simulation of the objects of study was carried out within the framework of the density functional theory in the local density approximation.

When performing calculations, the exchange-correlation functional is approximated by a generalized gradient approximation (GGA):

$$E_{xc}^{GGA}[n] = \int n(\mathbf{r}) \varepsilon^{GGA}(n(\mathbf{r}), |\Delta n(\mathbf{r})|) n(\mathbf{r}) d\mathbf{r},$$

Where $n(\mathbf{r})$ is the density of a non-degenerate ground state of a system of N electrons in a potential $v(\mathbf{r})$, corresponding to the ground state Ψ and energy E , ε^{GGA} is the universal functional GGA, $e_{xc}(n)$ is exchange-correlation energy of a homogeneous gas with a density n .

The main parameters of the computing resource are: Intel (R) Core (TM) i7-4790 CPU @ 3.6 GHz 8 core processor, 8 GB RAM, system type – 64-bit operating system, operating system – Windows 8.1.

The position of the electron is described by the wave function $\psi(x, y, z)$. The probability of finding

an electron at a certain point (x, y, z) is described by the expression $|\psi(x, y, z)|^2$, where the total probability $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, y, z)|^2 dx dy dz$ is normalized to one.

Electrons at the bottom of the conduction band behave like free particles (with an effective mass) trapped in a box. Consider the electrons of the conduction band, but the result for holes is similar. For our parabolic conduction band:

$$(E - E_c) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}.$$

For electrons in a rectangular volume L_x through L_y through L_z with an infinite limiting potential $U(x, y, z) = 0$ inside the box and outside ∞), the electron wave function ψ should reach zero and take the form of a harmonic function inside the region. Wave function solution:

$$\psi(x, y, z) = \sin(k_x x) \sin(k_y y) \sin(k_z z),$$

where k_x, k_y и k_z are wave vectors for an electron in directions x, y and z . The real wave function in a solid is more complex and periodic (with a crystal lattice), but this is a good approximation for parabolic regions near the edges of the zone.

Fulfillment of boundary conditions: when x, y or $z = 0$, the sinusoidal functions vanish. On

opposite boundaries of the rectangular region, $\sin(k_x L_x) = 0$, $\sin(k_y L_y) = 0$, and $\sin(k_z L_z) = 0$, for directions x, y and z . Allowed wave vectors satisfy:

$$k_x L_x = \pi n_x, k_y L_y = \pi n_y, k_z L_z = \pi n_z,$$

where n_x, n_y, n_z are whole numbers [24].

Simulation results

Using computer simulation, the density spectra of the states of the NaF nanocrystal were obtained in various cluster compounds ($\text{Na}_{13}\text{F}_{14}$, $\text{Na}_{12}\text{F}_{13}$, Na_4F_5 , $\text{Na}_{22}\text{F}_{23}$, $\text{Na}_{21}\text{F}_{22}$) at a temperature of 1 K (Figure 2). The total and specific energy is calculated not only in the indicated objects, but also in their “positive” twins (table 1).

In Figure 2, a certain amount of energy levels in the energy range from -20 eV to 20 eV are clearly visible. In this case, in all spectra (Fig. 2 a – f), the first pronounced narrow energy level is located in the region of -18 eV. The main relatively wide energy level is observed in the region -1.5 ÷ -2 eV to 0.5 eV. Then a series of narrow energy levels is recorded in the energy range from 3 eV to 16 ÷ 20 eV. The characteristic form of energy levels in the density spectra of states indicates that a NaF nanocrystal in various cluster compounds ($\text{Na}_{13}\text{F}_{14}$, $\text{Na}_{12}\text{F}_{13}$, Na_4F_5 , $\text{Na}_{22}\text{F}_{23}$, $\text{Na}_{21}\text{F}_{22}$) at 1 K can be attributed to quantum dots.

Table 1 – Full and specific energy of NaF nanocrystal

Object	Total energy, eV	Specific energy, eV	Object	Total energy, eV	Specific energy, eV
$\text{Na}_{13}\text{F}_{14}$	-9140,61667	-338,5413581	$\text{Na}_{14}\text{F}_{13}$	- 8510,59120	-315,2070815
$\text{Na}_{12}\text{F}_{13}$	-8480,54235	-339,221694	$\text{Na}_{13}\text{F}_{12}$	- 7852,99247	-314,1196988
Na_4F_5	-3251,71604	-361,3017822	Na_5F_4	- 2620,11205	-291,1235611
$\text{Na}_{22}\text{F}_{23}$	-15030,90457	-334,0201016	$\text{Na}_{23}\text{F}_{22}$	- 14400,23120	-320,0051378
$\text{Na}_{21}\text{F}_{22}$	-14368,42587	-334,1494388	$\text{Na}_{22}\text{F}_{21}$	- 13742,51906	-319,5934665

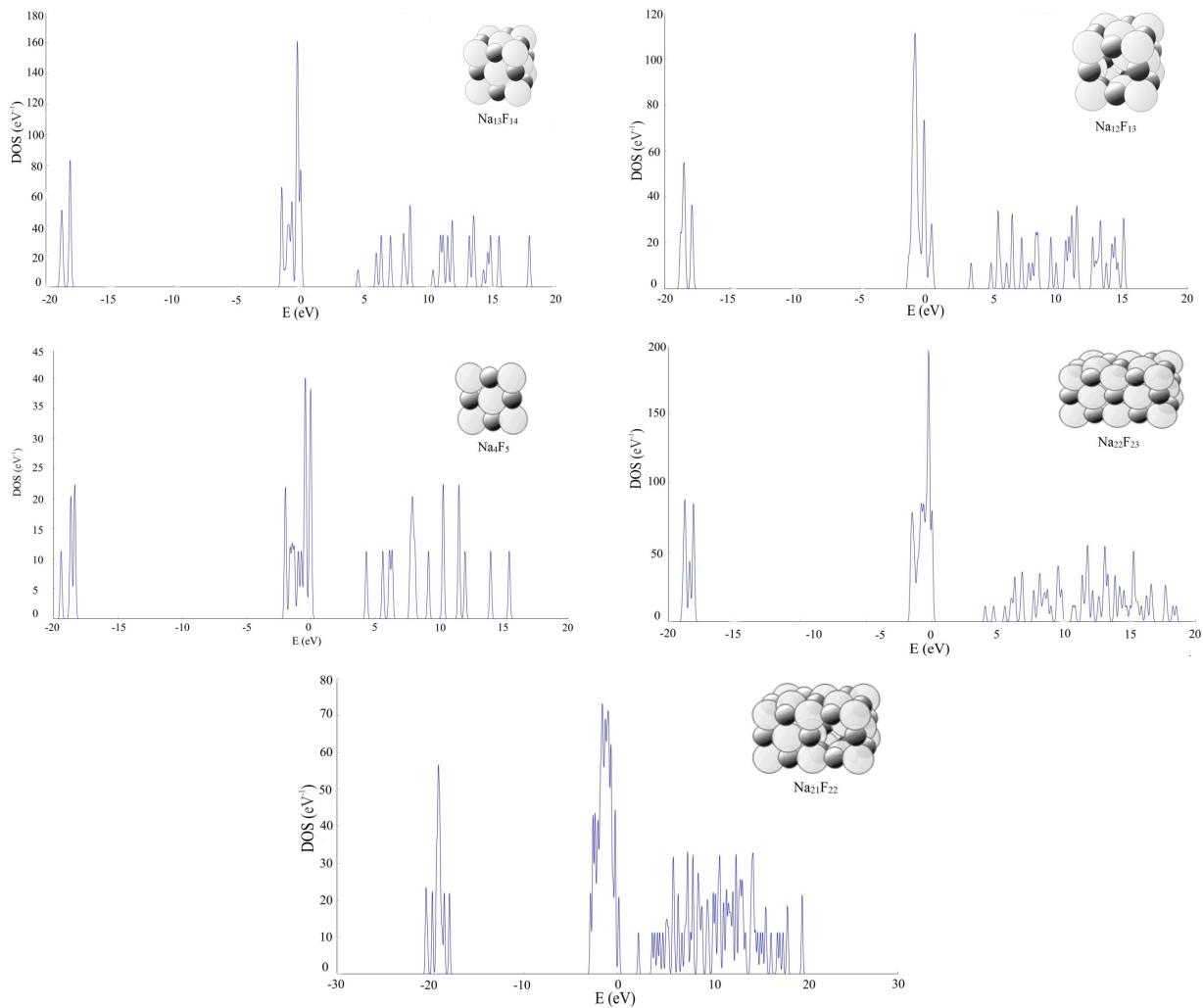


Figure 2 – Density of states of NaF nanocrystal in various cluster compounds
 $(\text{Na}_{13}\text{F}_{14}, \text{Na}_{12}\text{F}_{13}, \text{Na}_4\text{F}_5, \text{Na}_{22}\text{F}_{23}, \text{Na}_{21}\text{F}_{22})$

When plotting the dependence of the total energy on the number of elements in the negatively charged clusters $\text{Na}_{13}\text{F}_{14}$, $\text{Na}_{12}\text{F}_{13}$, Na_4F_5 , $\text{Na}_{22}\text{F}_{23}$, $\text{Na}_{21}\text{F}_{22}$, we observe that the points lie along a straight line (Figure 3). A similar qualitative result is obtained with positively charged clusters of $\text{Na}_{14}\text{F}_{13}$, $\text{Na}_{13}\text{F}_{12}$, Na_5F_4 , $\text{Na}_{23}\text{F}_{22}$, $\text{Na}_{22}\text{F}_{21}$.

According to the table, the total energy in negatively charged clusters of $\text{Na}_{13}\text{F}_{14}$, $\text{Na}_{12}\text{F}_{13}$, Na_4F_5 , $\text{Na}_{22}\text{F}_{23}$, $\text{Na}_{21}\text{F}_{22}$ varies from -3251.71604 eV to -15030.90457 eV. However, the specific energy for the $\text{Na}_{13}\text{F}_{14}$, $\text{Na}_{12}\text{F}_{13}$, $\text{Na}_{22}\text{F}_{23}$, $\text{Na}_{21}\text{F}_{22}$ clusters has a narrower interval in the region

from -334.0201016 eV to -339.22161694 eV. At the same time, for the Na_4F_5 crystal, the specific energy is the smallest value of -361.3017822 eV.

The total energy in positively charged clusters of $\text{Na}_{14}\text{F}_{13}$, $\text{Na}_{13}\text{F}_{12}$, Na_5F_4 , $\text{Na}_{23}\text{F}_{22}$, $\text{Na}_{22}\text{F}_{21}$ varies from -2620.11205 eV to -14400.23120 eV. However, the specific energy for $\text{Na}_{14}\text{F}_{13}$, $\text{Na}_{13}\text{F}_{12}$, $\text{Na}_{23}\text{F}_{22}$, $\text{Na}_{22}\text{F}_{21}$ clusters also has a narrow interval in the range from -314.1196988 eV to -320.0051378 eV. At the same time, for the Na_5F_4 crystal, the specific energy is the highest value of -291.1235611 eV.

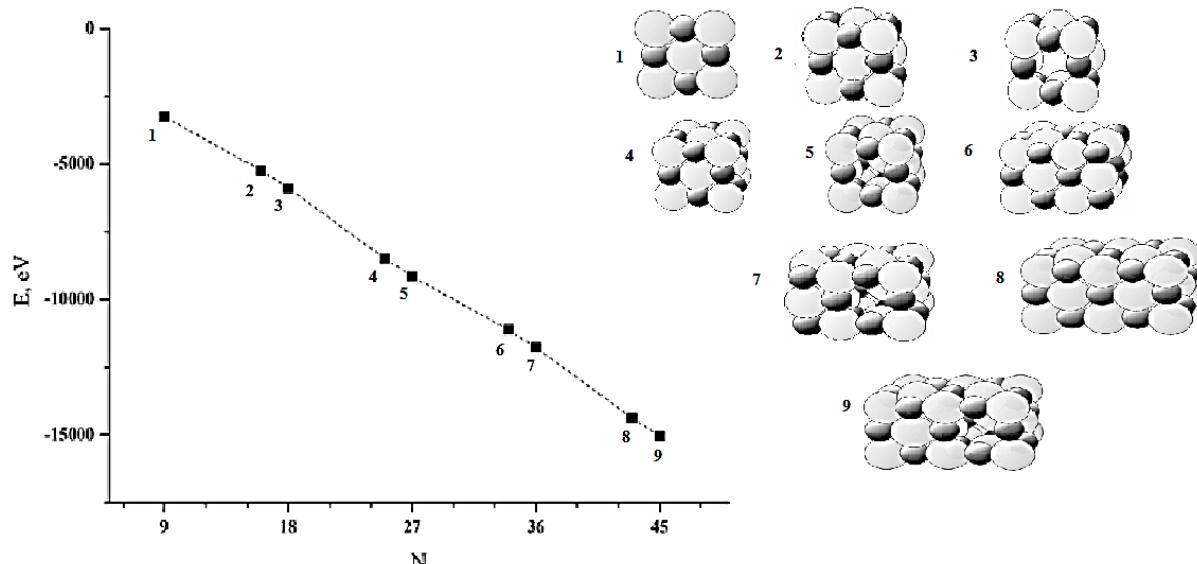


Figure 3 – Dependence of total energy on the number of elements in NaF clusters

Conclusion

Thus, in this work, in the framework of the density functional theory, the density of states and the total energy of the NaF nanocrystal are calculated, and the results of computer simulation of the band structure in various cluster compounds

(Na₁₃F₁₄, Na₁₂F₁₃, Na₄F₅, Na₂₂F₂₃, Na₂₁F₂₂) are presented at a temperature of 1 K. Simulation of characteristics implemented in the program Atomistix ToolKit with Virtual NanoLab. The characteristic form of the density of states suggests that these objects can be attributed to quantum dots.

References

- 1 Lushchik Ch., Lushchik A. Evolution of Anion and Cation Excitons in Alkali Halide Crystals // Physics of the Solid State. – 2018. – Vol. 60. – P. 1487-1505.
- 2 Shunkeyev K., Sergeyev D., Myasnikova L., Barmina A., Shunkeyev S., Zvanturina N., Aimaganbetova Z. Vacancy dipole currents of thermostimulated depolarization in a plastically deformed KCl crystal // Russian Physics Journal. – 2014. – Vol. 57, №.4. – P.451-458.
- 3 Lushchik A., Lushchik Ch., Vasil'chenko E., Popov A.I. Radiation creation of cation defects in alkali halide crystals: Review and today's concept // Low Temperature Physics. – 2018. – Vol. 44. – No. 4. – P. 357-367.
- 4 Shunkeyev K., Zvanturina N., Aimaganbetova Z., Myasnikova L., Barmina A., Sagymbaeva Sh., Sergeyev D. Features of the action of an uniaxial deformation on the radiative annihilation of excitons in KBr crystal // Journal of Physics: Conf. Series. – 2018. – Vol. 1115. – 052010.
- 5 Shunkeyev K., Zvanturina N., Aimaganbetova Z., Barmina A., Myasnikova L., Sagymbaeva Sh., Sergeyev D. The specifics of radiative annihilation of self-trapped excitons in a KI-Tl crystal under low-temperature deformation // Low temperature physics. – 2016. – Vol. 42. – №7. – P. 580-583.
- 6 Toyozawa Y. Elementary processes in luminescence // J. of Luminescence. – 1976. – Vol. 12/13. – P. 13-21.
- 7 Mathews M.S., Amaechi B.T., Ramalingam K., Ccahuana-Vasquez R.A., Chedjieu I.P., Mackey A.C., Karlinsey R.L. In situ remineralisation of eroded enamel lesions by NaF rinses // Archives of oral biology. – 2012. – Vol. 57. – P. 525-530.
- 8 Robert L. Whetten. Alkali Halide Nanocrystals // Acc. Chem. Rev. – 1993. – Vol. 26. – P. 49-56.
- 9 Rainer D. Beck, Pamela St. John, Margie L. Homer, Robert L. Whetten. Demetallization of alkali/alkali-halide clusters: impact-induced fragmentation of cubic Na₁₄F₁₂ // Chemical physical letters. – 1991. – Vol. 187. – N 1,2. – P. 122-128.
- 10 Pamela M. St. John, Rainer D. Beck, Robert L. Whetten. Reactions in Cluster-Surface Collisions // Physical review letters. – 1992. – Vol. 69. – N 9. – P. 1467-1470.
- 11 Lumeau J., Chamma K., Glebova L., Glebov L. X-ray diffraction study of NaF nano-crystals in photo-thermo-refractive glass // Journal of Non-Crystalline Solids. – 2014. – Vol. 405. – P. 188–195.
- 12 Messaoudi I.S., Zaoui A., Ferhat M. Band-gap and phonon distribution in alkali halides // Phys. Status Solidi B. – 2014. – P. 1-6.

- 13 Mamula B.P., Kuzmanović B., Ilić M.M., Ivanović N., Novaković N., Bonding mechanism of some simple ionic systems: Bader topological analysis of some alkali halides and hydrides revisited // *Physica B: Condensed Matter*. – 2018. – Vol. 545. – P. 146-151.
- 14 Cui He, Cui-E Hu, Tian Zhang, Yuan-Yuan Qi, Xiang-Rong Chen. Lattice dynamics and thermal conductivity of cesium chloride via first-principles investigation // *Solid State Communications*. – 2017. – Vol. 254. – P. 31-36.
- 15 Ting Liang, Wen-Qi Chen, Cui-E. Hu, Xiang-Rong Chen, Qi-Feng Chen. Lattice dynamics and thermal conductivity of lithium fluoride via first-principles calculations // *Solid State Communications*. – 2018. – Vol. 272. – P. 28-32.
- 16 Chandra B.P., Chandra V.K., Jha Piyush, Patel R.P., Baghel R.N. Possibility of elasto-mechanoluminescence dosimetry using alkali halides and other crystals // *Radiation Measurements*. – 2015. – Vol. 78. – P. 9-16.
- 17 Chandra B.P. Mechanoluminescence induced by elastic deformation of coloured alkali halide crystals using pressure steps // *Journal of Luminescence*. – 2008. – Vol. 128. – P. 1217–1224.
- 18 Kucharczyk W. Photoelastic effect and density derivative of the refractive index in alkali halides // *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. – 1989. – Vol. 50(7). – P. 709-712.
- 19 Bryukvina L., Ivanov N., Nebogin S. Relationships between lithium and sodium nanoparticles and color centers formation in LiF and NaF crystals with hydroxide and magnesium ions impurities // *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. – 2018. – Vol. 120. – P. 133-139.
- 20 Pandey R., Yang X., Vail J.M., Zuo J. Derivation of Pair Potentials from First Principles and Simulation of NaF Clusters // *Solid State Communications*. – 1992. – Vol. 81(7). – P. 549-552.
- 21 Landman U., Scharf D., Jortner J. Electron Localization in Alkali-Halide Clusters // *Physical review letters*. – 1985. – Vol. 54. – N. 16. – P. 1860-1863.
- 22 Hoya J., Laborde J.I., Richard D., Rentería M. Ab initio study of F-centers in alkali halides // *Computational Materials Science*. – 2017. – Vol. 139. – P. 1-7.
- 23 Kong D., Dong C., Wei X., Man C., Lei X., Mao F., Li X. Size matching effect between anion vacancies and halide ions in passive film breakdown on copper // *Electrochimica Acta*. – 2018. – Vol. 292. – P. 817-827.
- 24 Jackson K.A. Local Spin Density Treatment of Substitutional Defects in Ionic Crystals with Self-Interaction Corrections // *Advances in Atomic, Molecular, and Optical Physics*. – 2015. – Vol. 64. – P. 15-27.
- 25 Myasnikova A., Mysovskya A., Paklin A., Shalaev A. Structure and optical properties of copper impurity in LiF and NaF crystals from ab initio calculations // *Chemical Physics Letters*. – 2015. – Vol. 633. – P. 218-222.

References

- 1 Ch. Lushchik and A. Lushchik, *Physics of the Solid State* **60**, 1487-1505 (2018).
- 2 K. Shunkeyev, D. Sergeyev, L. Myasnikova, A. Barmina, S. Shunkeyev, N. Zhanturina and Z. Aimaganbetova, *Russian Physics Journal* **57**, 451-458 (2014).
 - a. Lushchik, Ch. Lushchik, E. Vasil'chenko and A.I. Popov, *Low Temperature Physics*, **44**, 357-367 (2018).
- 3 K. Shunkeyev, N. Zhanturina, Z. Aimaganbetova, L. Myasnikova, A. Barmina, Sh. Sagymbaeva and D. Sergeyev, *Journal of Physics: Conf. Series* **1115**, 052010 (2018).
- 4 K. Shunkeyev, N. Zhanturina, L. Myasnikova, Z. Aimaganbetova, A. Barmina, Sh. Sagymbaeva and D. Sergeyev, *Low temperature physics* **42**, 580-583 (2016).
- 5 Y. Toyozawa, *J. of Luminescence* **12/13**, 13-21 (1976).
- 6 M.S. Mathews, B.T. Amaechi, K. Ramalingam, R.A. Ccahuana-Vasquez, I.P. Chedieu, A.C. Mackey and R.L. Karlinsey, *Archives of oral biology* **57**, 525-530 (2012).
- 7 R.L. Whetten, *Acc. Chem. Rev.* **26**, 49-56 (1993)
- 8 R.D. Beck, P.St. John, M.L. Homer and R.L. Whetten, *Chemical physical letters* **187**, 122-128 (1991).
- 9 P.M.St. John, R.D. Beck and R.L. Whetten, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 1467-1470 (1992).
- 10 J. Lumeau, K. Chamma, L. Glebova and L. Glebov, *Journal of Non-Crystalline Solids* **405**, 188–195 (2014).
- 11 I.S. Messaoudi, A. Zaoui and M. Ferhat, *Phys. Status Solidi B*, 1-6 (2014).
- 12 B.P. Mamula, B. Kuzmanović, M.M. Ilić, N. Ivanović and N. Novaković, *Physica B: Condensed Matter* **545**, 146-151 (2018).
- 13 Cui He, Cui-E Hu, Tian Zhang, Yuan-Yuan Qi and Xiang-Rong Chen, *Solid State Communications* **254**, 31-36 (2017).
- 14 Ting Liang, Wen-Qi Chen, Cui-E. Hu, Xiang-Rong Chen and Qi-Feng Chen, *Solid State Communications* **272**, 28-32 (2018).
- 15 B.P. Chandra, V.K. Chandra, Piyush Jha, R.P. Patel and R.N. Baghel, *Radiation Measurements* **78**, 9-16 (2015).
- 16 B.P. Chandra, *Journal of Luminescence* **128**, 1217–1224 (2008).
- 17 W. Kucharczyk, *Journal of Physics and Chemistry of Solids* **50(7)**, 709-712 (1989).
- 18 L. Bryukvina, N. Ivanov and S. Nebogin, *Journal of Physics and Chemistry of Solids* **120**, 133-139 (2018).
- 19 R. Pandey, X. Yang, J.M. Vail and J. Zuo, *Solid State Communications* **81(7)**, 549-552 (1992).
- 20 U. Landman, D. Scharf and J. Jortner, *Physical review letters* **54 (16)**, 1860-1863, (1985).
- 21 J. Hoya, J.I. Laborde, D. Richard and M. Rentería, *Computational Materials Science* **139**, 1-7 (2017).
- 22 D. Kong, C. Dong, X. Wei, C. Man, X. Lei, F. Mao and X. Li, *Electrochimica Acta* **292**, 817-827 (2018).
- 23 K.A. Jackson, *Advances in Atomic, Molecular, and Optical Physics* **64**, 15-27 (2015).
- 24 Myasnikova, A. Mysovskya, A. Paklin and A. Shalaev, *Chemical Physics Letters* **633**, 218-22, (2015).

МРНТИ 50.09.29

Мырзабекова М.М.¹, Гусейнов Н.Р.¹, Зайцев С.И.², Шабельникова Я.Л.²,
Муратов М.М.¹, Мурадова С.Р.¹, Турагбаева Т.Б.¹

¹ННЛОТ Казахский национальный университет имени аль-Фараби,
Казахстан, г. Алматы, e-mail: markizat.myrzabekova@gmail.com

²Институт проблем технологий микроэлектроники и особо чистых материалов (ИПТМ) РАН,
Россия, г. Черноголовка

ИЗУЧЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ ЭЛЕКТРОННОЙ ЛИТОГРАФИИ ПОСРЕДСТВОМ АСМ

В работе рассматривается один из методов формирования микро- и нано-изображений с высокой точностью контроля процесса – электронная литография. По сравнению с остальными технологиями наноструктурирования, в частности, с такими как фотолитография, рентгеновская литография, электронная литография является более универсальной. Если не требуется высокая производительность, то можно обойтись только одной электронной литографией. В данной работе описаны технологические процессы электронной литографии на кремниевой подложке с применением резиста на основе полимера ПММА. Облучение проводилось в камере СЭМ электронами с энергией 5 кэВ, 15 кэВ, 30 кэВ и дозой экспонирования 1-10000 мкКл/см². Анализ полученных образцов с помощью оптической и атомно-силовой микроскопии (АСМ) показал зависимость цвета и соответствующей толщины резиста от дозы облучения. На основе профилей толщины резиста, полученных с помощью АСМ, был проведен расчет таких параметров как положительная и негативная чувствительность, также контраст, которые являются определяющими параметрами для электронной литографии. В дополнение к значимости измеренных характеристик: чувствительности и контраста, представленная методика открывает экспериментальный способ изучения процессов взаимодействия электронов с веществом.

Ключевые слова: литография, электронная литография, АСМ, метод центрифугирования, ПММА, доза облучения.

Myrzabekova M.M.¹, Guseinov N.R.¹, Zaitsev S.I.², Shabelnikova Ya.L.²,
Muratov M.M.¹, Muradova S.R.¹, Turarbaeva T.B.¹

¹NNLOT, Al-Farabi Kazakh National University,
Kazakhstan, Almaty, e-mail: markizat.myrzabekova@gmail.com
²Institute of Microelectronics Technology and High-Purity Materials RAS, Russia, Chernogolovka

Study of the electron lithography parameters by AFM

The paper considers one of the methods of micro – and nano – images formation with high accuracy of process control – electronic lithography. Comparing to other nanostructuring technologies, such as photolithography, x-ray lithography in particular, electronic lithography is more versatile. If high productivity is not required, it is possible to use only one electron lithography. This paper describes the technological processes of electron lithography on a silicon substrate using a polymer-based resist PMMA. The irradiation was carried out in the SEM chamber by electrons with energy of 5 keV, 15 keV, 30 keV and an exposure dose of 1-10000 μ C/cm². The analysis of the obtained samples using optical and atomic force microscopy (AFM) showed the dependence of the color and the corresponding thickness of the resist on the radiation dose. The calculation of such parameters as positive and negative sensitivity and additionally contrast was carried out on the basis of the resist thickness profiles obtained by AFM. These characteristics are defining parameters for electron lithography. In addition to the significance of

the measured characteristics: sensitivity and contrast, the presented technique opens up an experimental way of studying the processes of interaction of electrons with matter.

Key words: lithography, electron lithography, AFM, spin-coating method, PMMA, exposure dose.

Мырзабекова М.М.¹, Гусейнов Н.Р.¹, Зайцев С.И.², Шабельникова Я.Л.²,
Мұратов М.М.¹, Мурадова С.Р.¹, Тұрарбаева Т.Б.¹

¹АТҮНЗ әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті,
Казахстан, Алматы к., e-mail: markizat.myrzabekova@gmail.com

²РГА Микроэлектроника Технологиясы және ерекше тазалағыш материалдар
мәселелері институты (МТМИ), Ресей, Черноголовка к.»

АСМ арқылы электронды литографияның параметрлерін зерттеу

Жұмыста процесті жоғары бақылау дәлдігімен микро- және нано-бейнелерді қалыптастыру әдістерінің бірі – электрондық литография қарастырылады. Басқа, атапайтқанда, фотолитография, рентгендік литография сияқты наноқұрылымдау технологияларымен салыстырғанда, электрондық литография өмбебап болып табылады. Егер жоғары өнімділік қажет болмаса, тек бір электрондық литографияны қолдануға болады. Бұл жұмыста кремний төсеннішіндегі PMMA полимері негізіндеғі резистті колдана отырып, электрондық литографияның технологиялық процестері сипатталған. Сәулелендіру СЭМ камерасында 5 кэВ, 15 кэВ, 30 кэВ энергиясы бар электрондармен және 1-10000 мКл/см² экспонаттау дозасымен жүргізілді. Алынған үлгілерді оптикалық және атомдық-күштейткіш микроскопия (АКМ) көмегімен талдау түсінің және резисттің тиісті қалындығының сәулелену дозасына тәуелділігі көрсетілді. АКМ бойынша есептелген резист қалындығының профильдері негізінде оң және теріс сезімталдық және контраст сияқты параметрлердің есептеуі жүргізілді. Бұл сипаттамалар электрондық литографияның шешуші параметрлері болып табылады. Өлшенген сипаттамалардың сезімталдық пен контрастың маңыздылығына қоса ұсынған техника электрондардың заттармен өзара әрекеттесу үрдістерін зерттеудің тәжірибелік әдісін ашады.

Түйін сөздер: литография, электрондық литография, АКМ, центрифугалау әдісі, PMMA, экспозициялық мөлшер.

Введение

Развитие современной технологии микроэлектроники идет в направлении миниатюризации элементов интегральных схем, а значит, непосредственно связано с усовершенствованием методов литографии. В последние 30 лет независимо и с переменной популярностью развивались подходы, основанные на использовании пучков частиц четырех типов: рентгеновских и ультрафиолетовых квантов, электронов и ионов [1]. Однако в последние годы, когда характерные размеры элементов микросхем существенно уменьшились, и стоит вопрос о преодолении суб-десяти-нанометрового рубежа, только методы электронно-лучевой и ионной литографии имеют потенциал продемонстрировать соответствующее разрешение.

Литография – это метод нанесения изображения на поверхность с помощью маски или шаблона. В основе литографии лежит физико-химический принцип точного «выборочного» структурирования поверхности с целью получения изображения или заданной схемы, а также подразумевающий получение оттиска с совершенно гладкой поверхности, которая, благодаря

соответствующей обработке, приобретает свойство на отдельных своих участках принимать специальную литографскую краску [2]. Современная литография в больших объемах используется для производства афиш, карт, книг, газет и упаковок – примером может служить любой гладкий, серийно выпускаемый продукт с печатью на нем.

Процесс (микро- и нано-) литографии состоит из множества технологических операций, в совокупности предназначенных для формирования рельефного рисунка на специальном чувствительном слое (резисте) при изготовлении полупроводниковых приборов, интегральных микросхем и сверхпроводниковых наноструктур. Сформированный на специально нанесенном слое рисунок, как правило, необходим для последующей обработки поверхности – травления, напыления или электроосаждения, – для переноса рельефного рисунка непосредственно на структурный слой или подложку [3].

В настоящее время по способу воздействия литография разделяется на фотолитографию (облучение ультрафиолетовым излучением) [4], рентгеновскую литографию (облучение рентгеновским излучением) [5], коллоидную ли-

графию [6], электронно-лучевую (облучение электронами) [7] и ионно-лучевую (облучение ионами) [8].

Преимущества применения многолучевой электронной литографии проявляются в различных областях – и все они ведут к уменьшению стоимости и увеличению адаптивности технологических процессов, используемых в производстве интегральных схем (ИС). Данная технология может быть использована как для пластин диаметром 300 мм, так и 200 мм [9]. Сам метод электронно-лучевой литографии применяется для изготовления субмикронных и наноразмерных топологических элементов посредством экспонирования электронным лучом поверхности материала чувствительного к облучению [2, 10]. В отличие от электронной литографии, размеры элементов в фотолитографическом процессе принципиально ограничены длиной волны используемого излучения [11].

Область применения электронной литографии – монетные дворы, фотолитография (изготовление масок), сотовые телефоны [12-14].

Применение электронно-лучевой литографии позволяет:

- а) получать элементы рисунка с размерами менее или равными 0,01 мкм (для фотолитографии не менее 0,5 мкм);
- б) с высокой точностью контролировать дозу электронного пучка, падающего на резист и подложку;
- в) легко отклонять и модулировать электронный пучок с высокой точностью электрическими и магнитными полями;
- г) формировать в ряде случаев топологию схемы непосредственно на пластине;
- д) автоматизировать технологию создания топологического рисунка;
- е) профилировать электронный пучок. [15,16].

В данной работе представлены результаты изучения особенностей электронно-лучевой литографии, в частности таких важных параметров, как контраст и чувствительность полимера.

Методика выполнения и расчеты

Схематически современный процесс наноструктурирования выглядит довольно просто (рис. 1). Сначала на рабочую подложку (обычно это пластина кремния) наносится тонкий слой резиста (толщиной десятки- сотни нанометров). Современные резисты представляют собой по-

лимерные материалы чувствительные к излучению, растворимость облученных участков либо увеличивается (резист позитивного тона), либо уменьшается (резист негативного тона). Затем проводится экспонирование, некоторые области резиста подвергаются облучению электронным или световым пучком [3].

Следующим шагом является проявление (обычно используется жидкостное травление), из-за изменения растворимости облученные области позитивного резиста растворяются полностью до подложки. В случае негативных резистов удаляются необлученные участки резиста. Далее, как показано на рисунке 1, полученная структура подвергается сухому «вертикальному» травлению и рисунок из резиста переносится в подложку. Но очень распространенным является процесс «лифт-офф», при котором происходит напыление например слоя металла), а затем в сильном растворителе удаляется оставшийся резист. Вместе с резистом удаляется и слой нанесенного металла. В результате на подложке остается рисунок в виде облученных областей (или инверсный рисунок в случае негативного резиста). Очень часто вместо слов литография, облучение или экспонирование употребляют термин рисование [3].

Необходимые материалы для получения слоя резиста: подложка кремния, вакуумный насос, дистиллированная вода, ацетон, ПММА (полиметилметакрилат) марки ЭЛП-20. Для работы была собрана установка центрифугирования, для получения тонкого слоя резиста.

Экспонирование проводилось в сканирующем электронном микроскопе (СЭМ) Quanta 200i 3D, FEI Company. Для контроля результатов эксперимента использовался оптический микроскоп DM 6000M, Leica.

Реализация нанесения резиста на кремниевую подложку:

Для начала производится подготовка подложек с помощью очистки ацетоном. Для быстрой химической реакции ацетон нагревается до 150°C в течение 10-15 секунд. Далее подложки промывают сначала в изопропиле (спирт) и затем в дистиллированной воде. Остатки воды удаляют потоком воздуха. Важным фактором является отсутствие капель воды или пылинок, которые могут существенно помешать получению однородного слоя резиста постоянной толщины.

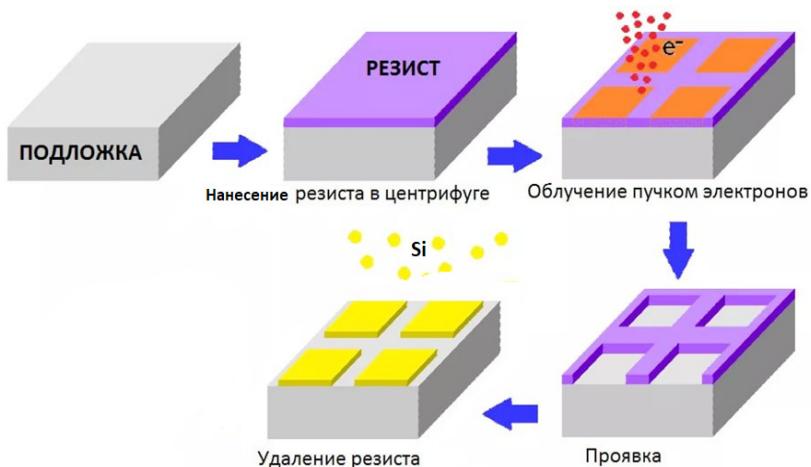


Рисунок 1 – Процесс проведения электронной литографии



Рисунок 2 – Технология нанесения резиста на кремниевую подложку

Далее подложка устанавливается в центр вакуумной присоски. Очень важно установить подложку в точности по центру, так как от этого зависит мера распространения раствора по поверхности и качество образуемой пленки. Система центрифугирования настраивается на скорость 3000 оборотов/мин (чем меньше скорость вращения, тем больше толщина пленки). В центр подложки с помощью пипетки наносится раствор ПММА, толщина которого определяется по цвету формируемой пленки. На качество пленки влияют разные факторы, в том числе чистота и концентрация полимера в растворе. Требуемая вязкость раствора достигается добавлением растворителя, и опытным путем подбирается нужная концентрация.

Полученная полимерная пленка на поверхности подложки подвергается сушке при температуре 150°С.

Облучение в СЭМ проводилось при следующих параметрах: диаметр пучка 30 нм, энергиях 5; 15; 30 кэВ и значении тока 106,22 нА.

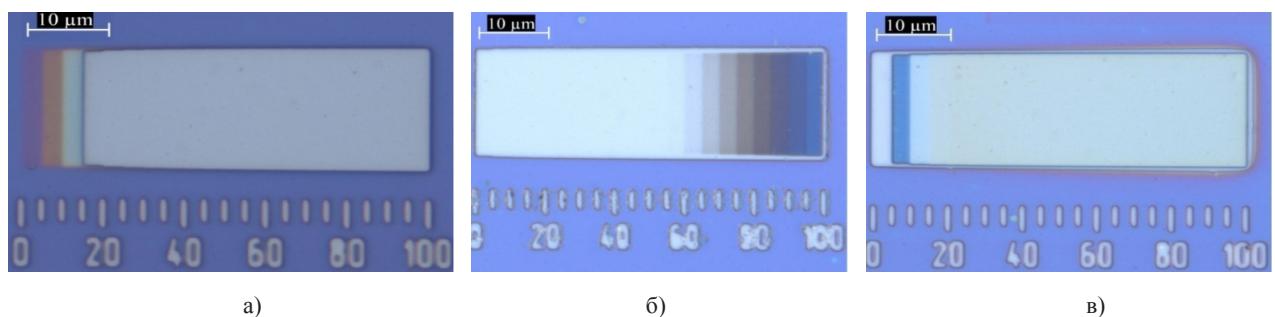
Доза экспонирования была рассчитана по следующей формуле:

$$D = \frac{I \times t}{s} \quad (1)$$

Следующим шагом является исследование образцов с помощью оптической микроскопии. На рисунке 3 представлены оптические микрофотографии образцов, облученных электронным пучком с энергией 5кэВ.

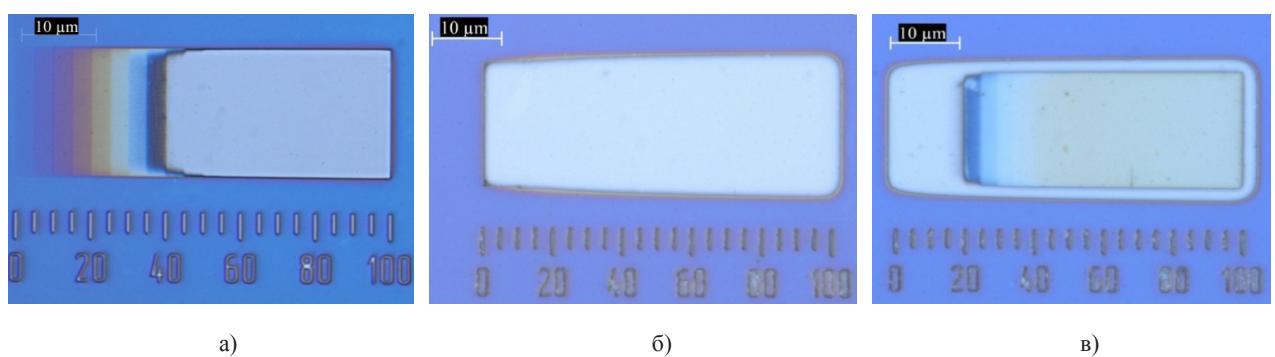
Была проведена серия экспериментов по облучению образцов электронным пучком энергии 15 кэВ, оптические микрофотографии которых показаны на рисунке 4.

Так же были получены оптические микрофотографии образцов с дозой экспонирования от 1 до 10000 мКл/ см² при энергии 30 кэВ (рис. 5).



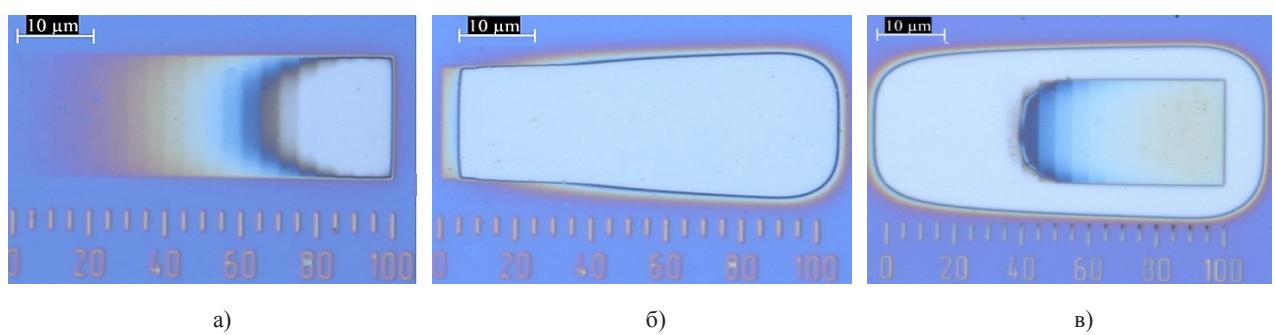
а) доза экспонирования от 1 до 100 ($\text{мкКл}/\text{см}^2$); б) доза экспонирования от 10 до 1000 ($\text{мкКл}/\text{см}^2$);
в) доза экспонирования от 100 до 10000 ($\text{мкКл}/\text{см}^2$)

Рисунок 3 – Оптические микрофотографии образцов облученных электронным пучком с энергией 5 кэВ



а) доза экспонирования от 1 до 100 ($\text{мкКл}/\text{см}^2$); б) доза экспонирования от 10 до 1000 ($\text{мкКл}/\text{см}^2$);
в) доза экспонирования от 100 до 10000 ($\text{мкКл}/\text{см}^2$)

Рисунок 4 – Оптические микрофотографии образцов облученных электронным пучком с энергией 15 кэВ



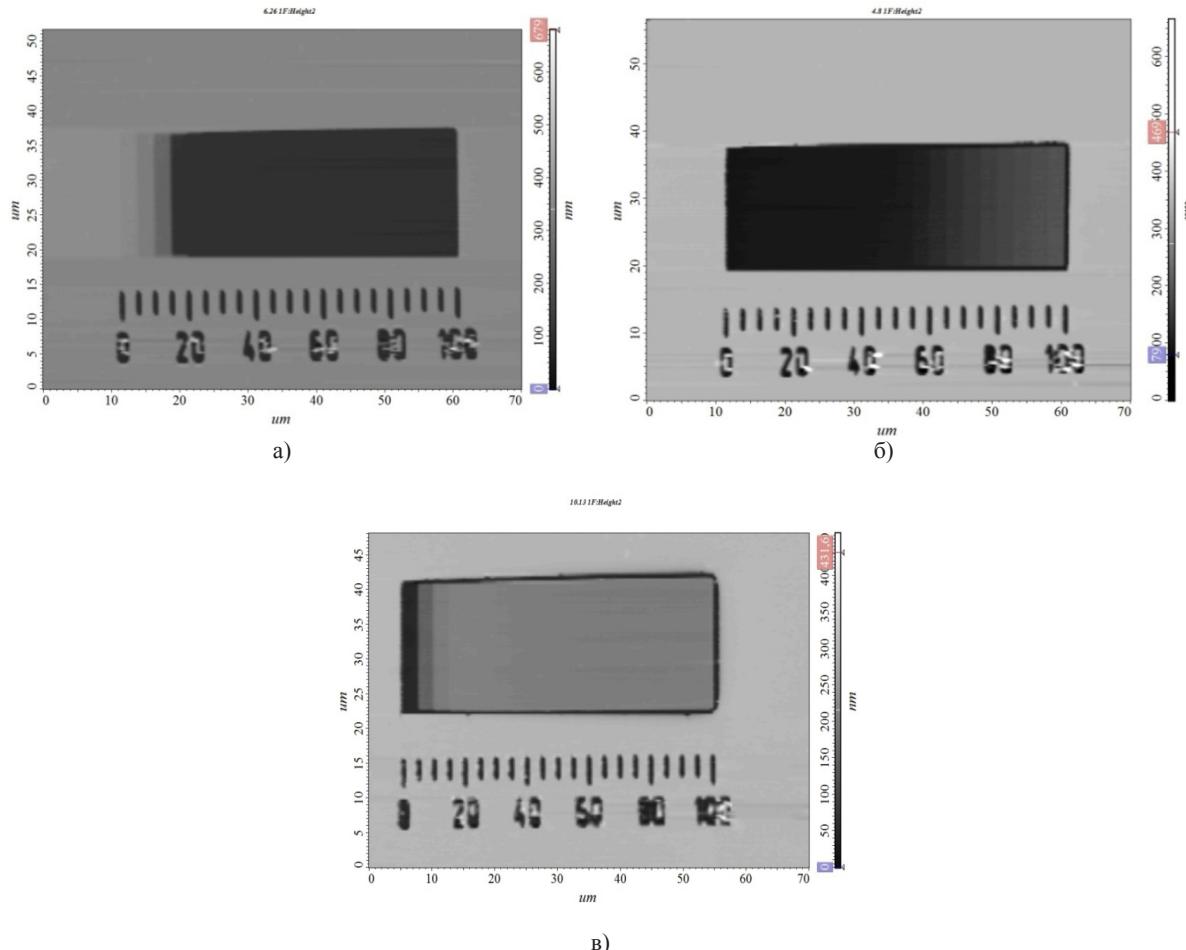
а) доза экспонирования от 1 до 100 ($\text{мкКл}/\text{см}^2$); б) доза экспонирования от 10 до 1000 ($\text{мкКл}/\text{см}^2$);
в) доза экспонирования от 100 до 10000 ($\text{мкКл}/\text{см}^2$)

Рисунок 5 – Оптические микрофотографии образцов облученных электронным пучком с энергией 30 кэВ.

Следующим шагом является исследование образов с помощью атомно-силовой микроскопии (ACM). Для этой задачи был использован атомно-силовой микроскоп Solver Spectrum, NT-MDT. Были получены ACM изображения и

определенна толщина резиста, которая составляет 249,15 нм.

Рисунок 6 представляет собой топографию образцов, которые облучены электронами с энергией 5 кэВ с различной дозой экспонирования.



а) доза экспонирования от 1 до 100 ($\mu\text{Кл}/\text{см}^2$); б) доза экспонирования от 10 до 1000 ($\mu\text{Кл}/\text{см}^2$);
в) доза экспонирования от 100 до 10000 ($\mu\text{Кл}/\text{см}^2$)

Рисунок 6 – АСМ изображения образцов облученных электронным пучком с энергией 5 кэВ

Также были получены АСМ изображения образцов, облученных электронным пучком энергией 15 кэВ, которые показаны на рисунке 7.

В ходе данного исследования также был определен рельеф поверхности образцов, облученных электронным пучком энергией 30кэВ (рис. 8).

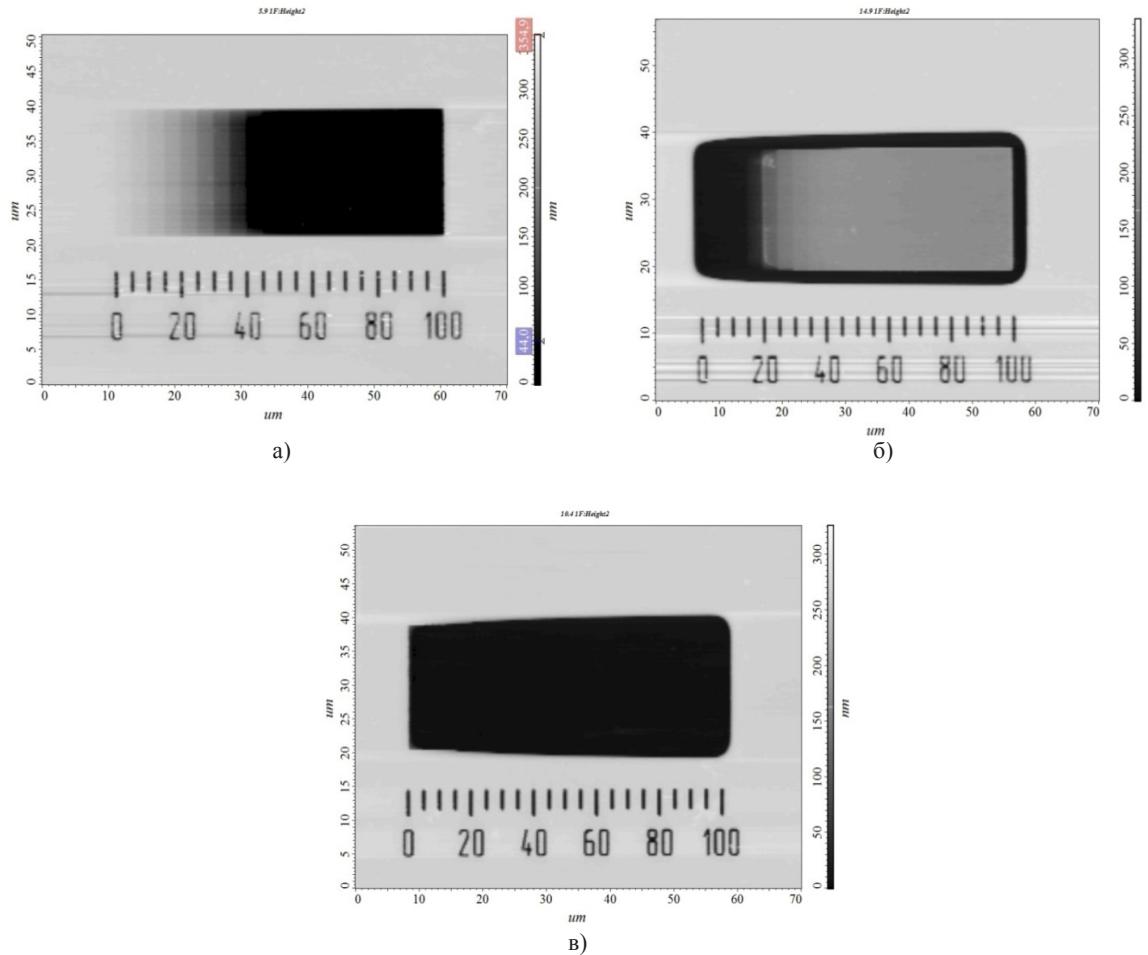
Обработка результатов

Для успешного применения резистов на практике, необходимо знание нескольких параметров, называемых дозовыми характеристиками [17]. Дозовыми характеристиками электронных резистов являются чувствительность и контрастность. Чувствительность позитивного резиста характеризует дозу, которую необходи-

мо передать участку этого резиста для его полной проявки за приемлемое время (обычно 1-2 минуты). Чувствительность, как и дозу экспонирования электронного резиста обычно измеряют в $\text{Кл}/\text{см}^2$ [18].

Посредством топографий, полученных на АСМ, был построен профиль образца, облученного энергией 5кэВ. Из рисунка 9 выявлен параметр положительной и негативной чувствительности, контраста для ПММА марки ЭЛП-20.

Параметр положительной чувствительности был рассчитан посредством программы Origin. Линия начала экспонирования соответствует параметру положительной чувствительности. Параметр положительной чувствительности для 5 кэВ составляет 15,64 $\mu\text{Кл}/\text{см}^2$.



а) доза экспонирования от 1 до 100 (мКл/ см^2); б) доза экспонирования от 10 до 1000 (мКл/ см^2).
в) доза экспонирования от 100 до 10000 (мКл/ см^2).

Рисунок 7 – АСМ изображения образцов облученных электронным пучком с энергией 15кэВ

Половина толщины резиста характеризует параметр негативной чувствительности. Параметр негативной чувствительности для 5кэВ равен 55,655 мКл/см^2 .

Другой важной характеристикой электронного резиста является контрастность. Она является характеристикой крутизны рельефа резиста после проявления [19].

Контраст был вычислен по следующей формуле [20]:

$$v = \gamma \left(\frac{D}{D_0} \right)^\gamma, \quad (2)$$

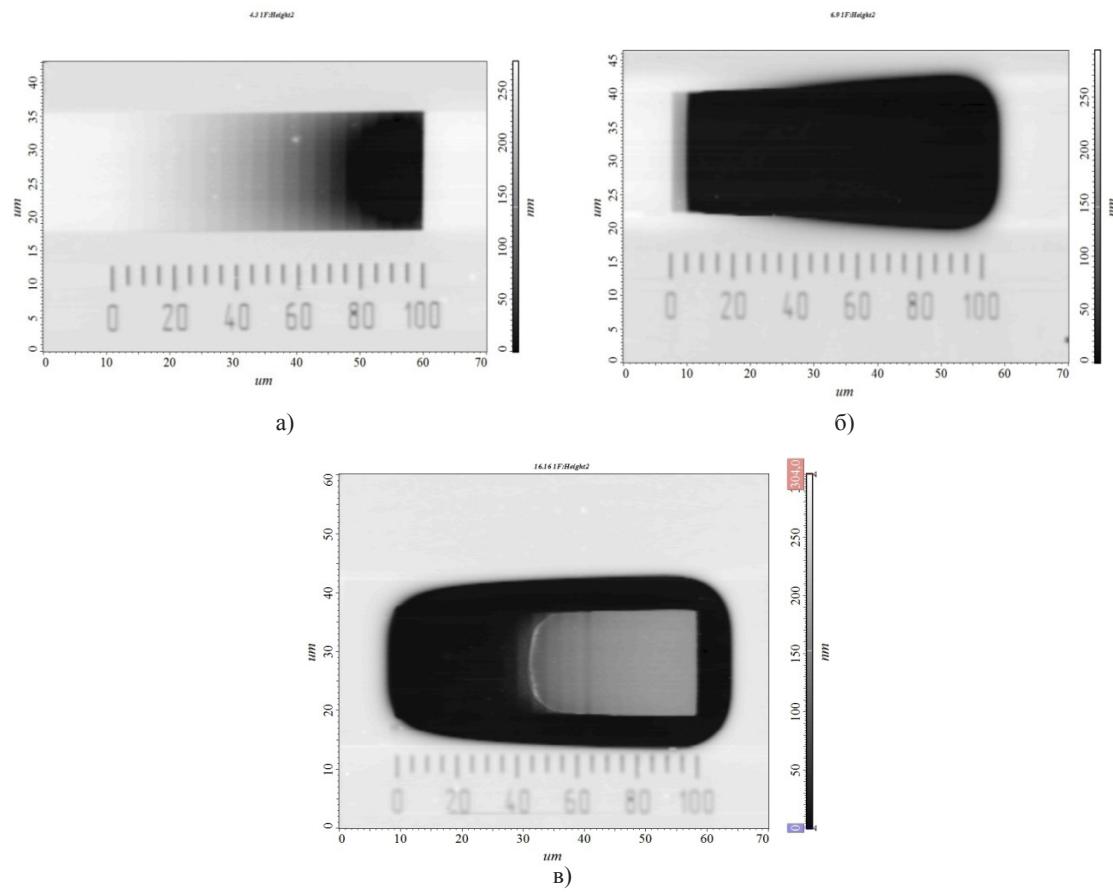
где v это скорость проявления области проэкспонированной с дозой D , а v_0 – скорость проявления области проэкспонированной с

дозой D_0 , параметр γ принимается за контрастность.

Параметр положительного контраста используемого резиста при 5 кэВ равен 2,34, а параметр негативного контраста составляет 0,76.

Так же в программе Origin был построен профиль образца облученного энергией 15кэВ. Параметр положительной и негативной чувствительности, контраста был рассчитан, как описывалось выше. Параметр положительной чувствительности для 15 кэВ равен 42,86 мКл/ см^2 . Параметр негативной чувствительности для 15кэВ составляет 84 мКл/см^2

Также был выявлен положительный контраст при 15 кэВ, который составляет 1,62, негативный контраст – 0,78.



а) доза экспонирования от 1 до 100 ($\mu\text{Кл}/\text{см}^2$); б) доза экспонирования от 10 до 1000 ($\mu\text{Кл}/\text{см}^2$).
в) доза экспонирования от 100 до 10000 ($\mu\text{Кл}/\text{см}^2$).

Рисунок 8 – ACM изображения образцов облученных электронным пучком с энергией 30кэВ

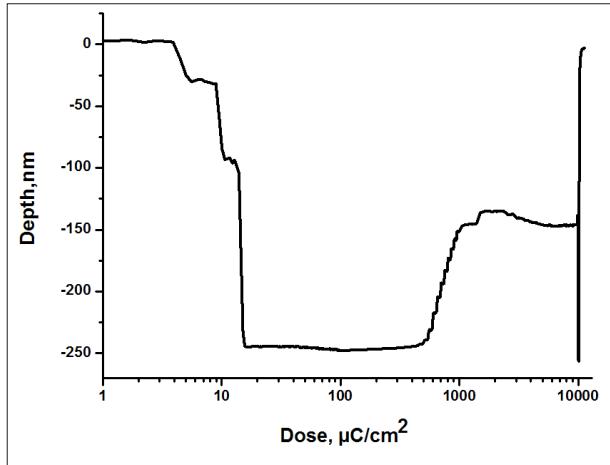


Рисунок 9 – Профиль ACM изображения образца облученного с энергией 5 кэВ

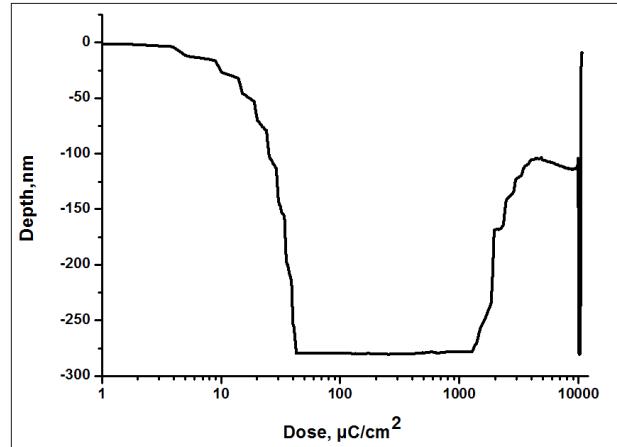


Рисунок 10 – Профиль ACM изображения образца облученного с энергией облучения 15 кэВ

Следующим этапом было изучение профиля образца, облученного электронами энергией 30 кэВ. Из рисунка 11 выявлен параметр положительной и негативной чувствительности, контраста для ПММА марки ЭЛП-20.

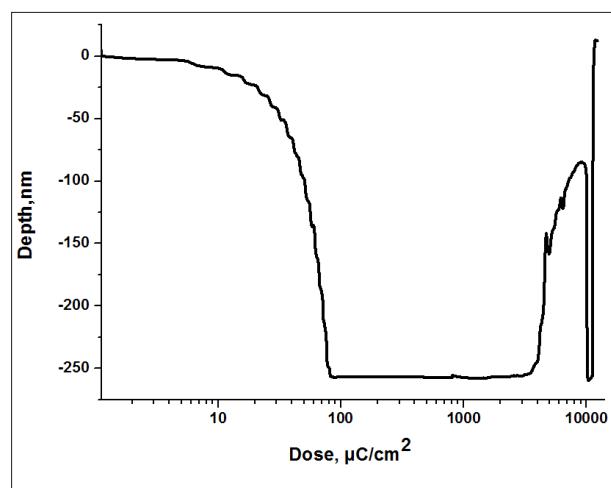


Рисунок 11 – Профиль ACM изображения образца облученного с энергией 30 кэВ

Параметр положительной чувствительности для 30 кэВ равен 83,14 мкКл/см². Параметр не-

гативной чувствительности 30 кэВ составляет 86,25 мкКл/см².

Положительный контраст при 30 кэВ для ПММА равен 1,17, негативный контраст для составляет 0,65.

Заключение

В данной статье было изучено воздействие электронного пучка на резист ПММА и выявлены дозовые характеристики. Выявлены параметры положительной чувствительности для 5, 15, 30 кэВ, которые равны соответственно 15,64; 42,86; 83,14 мкКл/см². Эти значения характеризуют минимальную дозу, необходимую для полного растворения резиста ПММА марки ЭЛП-20. Таким образом, в работе были вычислены параметры литографического процесса при разных энергиях, тем самым определены оптимальные условия для облучения полимера.

Благодарности

Работа была выполнена при поддержке МОН РК по грантовому финансированию № АР05134926 «Технология электронно-ионной литографии для голограммической защиты монет, слитков и изделий из драгоценных металлов».

Литература

- 1 Kratky S., Kolarik V., Horacek M., Meluzin P., Kral S. Combined e-beam lithography using different energies // Microelectronic Engineering. – 2017. – Vol. 177. – P. 30–34.
- 2 Саленко Д.С. История развития и области применения технологии МЭМС // Автоматика и программная инженерия. – 2013. – № 3(5). – С.68-74.
- 3 Такибаев Н.Ж., Зайцев С.И., Курмангалиева В.О., Насирова Д.М., Такибаева М.Н., Абдықадыров Б.К. Лабораторный практикум по физике: Виртуальный практикум Nanomaker, Нанотехнологии, Термодинамика: Учебное пособие. – Алматы: КазНПУ им. Абая, 2012. –140 с.
- 4 Cegielska P.J., Boltena J., Kima J. W., Schlachter F., Nowaka C., Wahlbrink T., Giesecke A. L. and Lemme M. C. Overlay Accuracy Limitations of Soft Stamp UV Nanoimprint Lithography and Circumvention Strategies for Device Applications // Microelectronic Engineering. – 2018. – Vol. 197. – P. 83-86.
- 5 Nazarov V., Goldenberg B. Application of ELN-200 in deep X-ray lithography // Physics Procedia. – 2016. – Vol. 84. – P. 201 – 204.
- 6 Mehrnoosh Mahmoodiana, Hamidreza Hajihoseinib, Shams Mohajerzadeha, Morteza Fathipour. Nano patterning and fabrication of single polypyrrole nanowires by electron beam lithography // Synthetic Metals. – 2019. – Vol. 249. – P. 14-24.
- 7 Shi X., Boden Stuart A. Scanning helium ion beam lithography // Frontiers of Nanoscience. – 2016. – Vol. 11. – P. 563-594.
- 8 Shi X., Prewett P., Huq E., Bagnall D.M., Robinson A.P.G., Boden S.A. Helium ion beam lithography on fullerene molecular resists for sub-10 nm patterning // Microelectronic Engineering. – 2016. – Vol. 155. – P. 74–78.
- 9 Гусейнов Н.Р., Муратов М.М., Габдуллин М.Т., Немкаева Р.Р., Мырзабекова М.М., Шабельникова Я.Л., Зайцев С.И. Экспериментальное изучения распределения энергии в ионно-лучевой литографии // 5 Международная научная конференция «Современные проблемы физики конденсированного состояния, нанотехнологии и наноматериалов». – Алматы, 17-18 Мая 2018. – С.193-194.
- 10 Scott Hector. Recent Advances in Lithography and High Level Critical Dimension Metrology Needs for Lithography // AIP Conference Proceedings. – 2005. – Vol. 788. – P. 359-368.
- 11 Kim H.S., Ahn S., Kim D.W., Kim Y.C., Ahn, S.J. Photo-mask fabrication by low-energy microcolumn lithography // Microelectronic Engineering. – 2009. – Vol. 86. – P. 2049–2052.

- 12 Mohammad M.A., Fito T., Chen J., Buswell S., Aktary M., Stepanova M., Dew S.K. Systematic study of the interdependence of exposure and development conditions and kinetic modelling for optimizing low-energy electron beam nanolithography // Microelectronic Engineering. – 2010. – Vol. 87. – P. 1104–1107.
- 13 Myrzabekova M.M., Sarkar S., Baigarinova G.A., Guseinov N.R., Ilyin A.M. Obtaining and research of new composite materials polymer-graphene // Physical Sciences and Technology. – 2014. – Vol. 1. – P. 4-9.
- 14 Vieu C., Carcenac F., Pepin A., Chen Y., Mejias M., Lebib A., Manin-Ferlazzo L., Couraud L., Launois H. Electron beam lithography: resolution limits and applications // Applied Surface Science. – 2000. – Vol. 164. – P. 111-117.
- 15 Tennant D.M., Bleier A.R. Electron Beam Lithography of Nanostructures // Reference Module in Materials Science and Materials Engineering. – 2016. – P. 1-25.
- 16 Rai-Choudhury P. Handbook of Microlithography, Micromachining and Microfabrication. – SPIE, 1997. – Vol. 1. – 776 p.
- 17 Vutova K., Mladenov G. Sensitivity, contrast and development process in electron and ion lithography // Microelectronic Engineering. – 2001. – Vol. 57. – P. 349–353.
- 18 Myrzabekova M. M., Guseinov N.R., Muratov M.M., Gabdullin M.T., Nemkayeva R. R., Tolkynbayeva T., Shabelnikova Ya. L., Zaitsev S. I. Experimental study of energy distribution in ion-beam lithography // Proc. 6th International Conference on Nanomaterials and Advanced Energy Storage Systems (INESS-2018). – Almaty, August, 2018. – P. 84.
- 19 Jordi Samàa, Guillem Domènec-Gila, Isabel Gràciac, Xavier Borrisé, Carles Cané, Sven Barthd, Frederik Steibe, Andreas Waage, Joan-Daniel Pradesa, Albert Romano-Rodríguez. Site-selectively grown SnO₂ NWs networks on micromembranes for efficient ammonia sensing in humid conditions // Sensors and Actuators B. – 2019. – Vol. 232. – P. 402-409.
- 20 Knyazev M.A., Dubonos S.V., Svintsov A.A., Zaitsev S.I. Fast electron resist contrast determination by “fitting before measurement” approach // Microelectronic Engineering. – 2007. – Vol. 84. – P. 1080–1083.

References

- 1 S. Kratky, V. Kolarik, M. Horacek, P. Meluzin, and S. Kral, Microelectronic Engineering, 177, 30–34 (2017).
- 2 D.S. Salenko, Automation and software engineering, 3 (5), 68-74 (2013). (in Russ).
- 3 N.Zh. Takibayev, S.I. Zaitsev, V.A. Kurmangalieva, D.M. Nasirov, M.N. Takibaev, B.K. Abdykadyrov, Laboratory workshop in physics: Virtual workshop nanomaker, Nanotechnology, Thermodynamics.Textbook, (Abay KazNPU, Almaty, 2012).- 140 p. (in Russ)
- 4 P.J. Cegielksia, J. Boltena, J.W. Kima, F. Schlachtera, C. Nowaka, T. Wahlbrinka, A. L. Gieseckea and M. C. Lemme, Microelectronic Engineering 197, 83-86 (2018).
- 5 V. Nazmov, Boris Goldenberg, Physics Procedia 84, 201-204 (2016).
- 6 M. Mahmoodiana, H. Hajihoseini, S. Mohajerzadeha, Morteza Fathipour, Synthetic Metals 249, 14-24 (2019).
- 7 Xiaoqing Shi, Stuart A. Boden, Frontiers of Nanoscience 11, 563-594 (2016).
- 8 Shi, X., Prewett, P., Huq, E., Bagnall, D. M., Robinson, A. P. G., & Boden, S. A., Microelectronic Engineering 155, 74–78 (2016).
- 9 N.R. Guseinov, M.M. Muratov, M.T. Gabdullin, R.R. Nemkayeva, M.M. Myrzabekova, Ya.L. Shabelnikova, S.I. Zaitsev, 5th Intern. Sc. Conf. "Modern Problems of Condensed Matter Physics, Nanotechnology and Nanomaterials", (Almaty, 17-18 May, 2018), p.193-194. (in Russ).
- 10 Scott Hector, AIP Conference Proceedings (2005), p. 359-368.
- 11 H.S. Kim, S. Ahn, D.W. Kim, Y.C. Kim, & S.J. Ahn, Microelectronic Engineering, 86, 2049–2052 (2009).
- 12 M.A. Mohammad, T. Fito, J. Chen, S. Buswell, M. Aktary, M. Stepanova, S.K. Dew, Microelectronic Engineering 87, 1104–1107 (2010).
- 13 M.M. Myrzabekova, S. Sarkar, G.A. Baigarinova, N.R. Guseinov, A.M. Ilyin, Physical Sciences and Technology 1, 4-9, (2014)
- 14 C. Vieu, F. Carcenac, A. Pepin, Y. Chen, M. Mejias, A. Lebib, L. Manin-Ferlazzo, L. Couraud, H. Launois, Applied Surface Science 164, 111-117 (2000).
- 15 D.M. Tennant and A.R. Bleier, Reference Module in Materials Science and Materials Engineering, 1-25 (2016).
- 16 P. Rai-Choudhury, Handbook of Microlithography, Micromachining and Microfabrication, (SPIE, 1997), 776.
- 17 K. Vutova, G. Mladenov, Microelectronic Engineering 57–58, 349–353 (2001).
- 18 M.M. Myrzabekova, N.R. Guseinov, M.M. Muratov, M.T. Gabdullin, R. R. Nemkayeva, T. Tolkynbayeva, Ya.L. Shabelnikova, S.I. Zaitsev., Proc. 6th Intern. Conf. on Nanomaterials and Advanced Energy Storage Systems (INESS-2018) (Almaty, August, 2018), p.84.
- 19 J. Samàa, G. Domènec-Gila, I. Gràciac, X. Borrisé, C. Cané, S. Barthd, F. Steibe, A. Waage, J.-D. Pradesa, A. Romano-Rodríguez, Sensors and Actuators B, 232, 402-409 (2019).
- 20 M.A. Knyazev, S.V. Dubonos, A.A. Svintsov, S.I. Zaitsev, Microelectronic Engineering 84, 1080–1083 (2007).

4-бөлім

**ЖЫЛУ ФИЗИКАСЫ ЖӘНЕ
ТЕОРИЯЛЫҚ ЖЫЛУ ТЕХНИКАСЫ**

Section 4

**THERMAL PHYSICS AND
THEORETICAL THERMAL ENGINEERING**

Раздел 4

**ТЕПЛОФИЗИКА И
ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ТЕПЛОТЕХНИКА**

IRSTI 28.17.23

**Askarova A.S.¹, Bolegenova S.A.¹, Maxsimov V.Yu.¹,
Bergaliyeva S.A.¹, Bolado S.²**

¹Al-Farabi national university, Kazakhstan, Almaty,

e-mail: bergaliyeva.saltanat@gmail.com

²University of Valladolid, Spain, Valladolid

NUMERICAL SIMULATION OF FUEL COMBUSTION PROCESSES TO REDUCE HARMFUL DUST AND GAS EMISSIONS USING OVER FIRE AIR

Currently, air pollution is a huge environmental problem. The participation of energy companies in environmental pollution by fuel combustion products and solid waste is significant. Above all, power plants operating on solid fuel are one of the main sources of air, water and soil pollution. Until recently, during coal combustion process the most part of attention has been paid to protecting the environment from solid pollutants, such as ash. Very little attention has been paid to the gas products of combustion reactions, especially to NO_x и SO₂.

Mainly NO and NO₂ of nitrogen oxides are found in the atmosphere. NO is an unstable component that oxidizes to NO₂ during 0.5–3 to 100 hours. The toxicity of NO₂ is 7 times higher than the toxicity of NO. Nitrogen oxides are most dangerous as an active ingredient in the formation of photochemical smog. Currently nitrogen oxides are recognized as the most toxic atmospheric pollutants, and their maximum permissible concentration is 6 times less than for sulfur dioxide. It is believed that emissions of nitrogen oxides generated during combustion contribute to the oxidation of precipitation, photochemical air pollution and depletion of the ozone layer.

In this regard, many studies are aimed at the development of technologies for environmentally friendly combustion, which provide harmful dust and gas emissions at the level of international standards.

One of the ways to reduce the concentration of nitrogen oxides NO_x is the stepwise combustion of a powdered coal mixture, in particular the "Over Fire Air" technology. The idea of this method is based on the fact that the main volume of air is supplied to powdered coal burners, and the rest of the air is supplied further along the height of the torch through special nozzles.

The article presents the study results of the Over Fire Air technology influence on the aerodynamic characteristics of the combustion chamber of the BKZ-160 boiler.

Key words: energy, combustion, nitrogen oxide, injector, combustion chamber, aerodynamics.

**Асқарова Ә.С.¹, Бөлекенова С.А.¹, Максимов И.Ю.¹,
Берғалиева С.А.¹, Боладо С.²**

¹Ал-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Қазақстан, Алматы қ.,
e-mail: bergaliyeva.saltanat@gmail.com

²Вальядолид университеті, Испания, Вальядолид қ.

Over Fire Air-ды қолданып зиянды шашақтарды тозаңды қалдықтарды азадай үшін отынды жағу процестерін сандық мөдөльдеу

Қазіргі уақытта атмосфералық ауаның ластануы күн тәртібіндегі өзекті экологиялық мәселе болып отыр. Энергетикалық, кәсіпорындардың қоршаған ортаны отынның жану өнімдерімен, қатты қалдықтармен ластануына қатысы айтартықтай дәрежеге жеткен және мұндай нысандарға ен алдымен қатты отынмен жұмыс жасайтын, әрі аяу, су және топырақты ластаушы негізгі көздердің бірі болып саналатын электр станциялары жатады. Соңғы кездері көмірді жағу барысында қоршаған ортаны қатты ластауыштардан, мысалы, құлден қорғауға баса назар

аударылып келді, алайда, жану реакциясының газды өнімдері, әсіресе NO_x пен SO_2 қатысты мәселелер киындық тудырып тұр.

Атмосферада азот totықтарының ішінде негізінен NO және NO_2 кездеседі. NO 0,5-3-тен 100 сағ ішінде NO_2 дейін totығатын орнықсыз компонент болып табылады. NO_2 улылығы NO улылығынан 7 есе жоғары. Азот totықтары фотохимиялық түмшаның түзілуі кезіндегі белсенді компонент ретінде қауіптілік тудырады. Қазіргі уақытта азот totықтары атмосфераның ең ірі улы ласташылары болып танылған, ал олардың шекті рұқсат етілген концентрациясы құкіртті газбен салыстырғанда 6 есе аз. Жану барысында қалыптасатын азот totықтарының қалдықтары атмосфералық ылғалдың totығуына, ауаның фотохимиялық ластануына және озон қабатының азғындалуына әкеліп соқтырады. Осы тұрғыда көптеген зерттеулер зиянды шаңгаздық тозанды қалдықтары халықаралық стандарттар денгейінде шығуын қадағалайтын таза жағу технологияларын жасауға бағытталған.

Азот totықтарының NO_x концентрацияларын кемітудің осындағы тәсілдеріне шаңқөмірлі қоспаны сатылай жағуды айтуға болады, оның ішінде нақтырақ айтсақ, «Over Fire Air» технологиясы. Аталған әдістің мәні ауаның негізгі көлемі шаңқөмірлі жанарғыларға, ал қалған ауа алаудың біліктігі бойымен арнайы соплолар арқылы берілетіндігіне негізделеді.

Мақалада Over Fire Air технологиясының БКЗ-160 қазандығының жану камерасының аэродинамикалық сипаттамаларына әсерін зерттеу нәтижелері көлтірлген.

Түйін сөздер: энергия, жану, азот оксиді, инжектор, жану камерасы, аэродинамика.

Аскарова А.С.¹, Болегенова С.А.¹, Максимов И.Ю.¹,
Бергалиева С.А.¹, Боладо С.²

¹Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Казахстан, г. Алматы,
e-mail: bergaliyeva.saltanat@gmail.com

²Университет Вальядолида, Испания, г. Вальядолид

Численное моделирование процессов сжигания топлива для снижения вредных пылегазовых выбросов с применением Over Fire Air

В настоящее время острой экологической проблемой является загрязнение атмосферного воздуха. Участие энергопредприятий в загрязнении окружающей среды продуктами сгорания топлива, твердыми отходами значительно, и это, прежде всего, электростанции, работающие на твердом топливе и являющиеся одним из основных источников загрязнения воздуха, воды и почвы. До последнего времени при сжигании угля внимание уделялось защите окружающей среды от твердых загрязнителей, например золы, значительно сложнее обстоит дело с газовыми продуктами реакций горения, и особенно с NO_x и SO_2 .

В атмосфере из оксидов азота встречаются в основном NO и NO_2 . NO является неустойчивым компонентом, который в течение от 0,5 – 3 до 100 ч окисляется до NO_2 . Токсичность NO_2 в 7 раз выше токсичности NO . Наибольшую опасность оксиды азота представляют как активный компонент при образовании фотохимического смога. Оксиды азота признаны в настоящее время наиболее токсичными загрязнителями атмосферы, а их предельно допустимая концентрация в 6 раз меньше, чем для сернистого газа. Считается, что выбросы оксидов азота, образующихся при горении, способствуют окислению атмосферных осадков, фотохимическому загрязнению воздуха и истощению озонового слоя.

В этой связи многие исследования направлены на разработку технологий экологически чистого сжигания, обеспечивающих вредные пылегазовые выбросы на уровне требований международных стандартов.

Одним из способов снижения концентрации оксидов азота NO_x является ступенчатое сжигание пылеугольной смеси, в частности технология «Over Fire Air». Суть данного метода заключается в том, что основной объем воздуха подается в пылеугольные горелки, а остальной воздух – далее по высоте факела через специальные сопла.

В статье представлены результаты исследования влияния технологии Over Fire Air на аэродинамические характеристики топочной камеры котла БКЗ-160.

Ключевые слова: энергия, горение, оксид азота, инжектор, топочная камера, аэродинамика.

Introduction

Energy is one of the leading industries of many industrialized countries. These countries have switched to the innovative development of this

industry, they have changed the system of view on its role and place in the modern and future society radically. The new system of view is reflected in the Smart Grid concept – the smart energy system, which should be the basis of the national energy and

innovation development policy of any country and should be taken into account in the development of the domestic energy.

Efficient energy use is a prerequisite for economic and social development, as well as improving the ecology.

In the "Kazakhstan-2050 Strategy" N.A. Nazarbayev noted that: "Kazakhstan is one of the key elements of global energy security..." .

Worldwide, the use of renewable energy resources (the share of solar and wind energy in the total energy consumption of the Republic of Kazakhstan is about 0.02%) is an integral part of measures to solve environmental problems.

However, solar and wind energy production is relatively expensive compared to traditional sources.

The country's coal power plants generate more than 80% of energy. Therefore, "in the future, coal will have been playing a significant role in the country's energy sector" [1-4].

Energy is one of the leading industries in many industrialized countries, including Kazakhstan. It should be noted that more than 80% of all energy produced in the world is produced by combustion organic fuel (Figure 1) [5]. In Kazakhstan, about 70% of electricity is generated from coal, 14.6% from hydro resources, 10.6% from gas and 4.9% from oil.

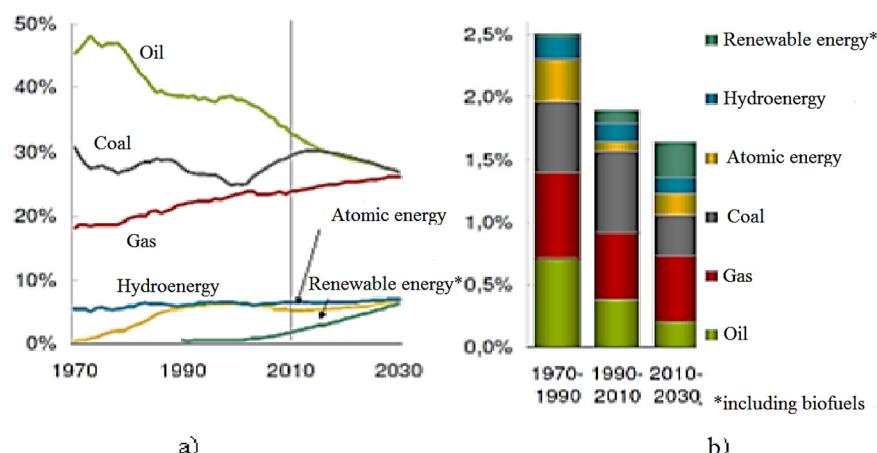


Figure 1 – The share of energy sources in the period from 1970 to 2030

The main part of electricity in Kazakhstan is generated by 37 thermal power plants operating on coal from Ekibastuz, Maikubinsk, Turgai and Karaganda basins.

Production of electricity by burning solid fuel (coal) for our country is the traditional and most developed way due to the presence of hard coal huge reserves. Therefore, in spite of the beginning of the search process for Kazakhstan of alternative, more environmentally friendly ways of obtaining energy, for a long time the power plants operating on solid fuels will have been being the basis of energy production and energy security of the country. The quality and quantity of gas emissions and waste of thermal power plants is greatly influenced by the type of used fuel [6-9].

The coal of Kazakhstan is cheap energy fuel, the reserves of which will be enough for many hundreds of years. At the same time, its low sulfur content and low nitrogen content (not more than one percent)

should be noted. However, at the same time, the coal of Kazakhstan, being a good energy fuel in its reactivity, has one big drawback – high ash content. The ash content of coal supplied from individual Kazakhstani fields to thermal power plants sometimes exceeds 70%. In compliance with the law in the UK it is – 22%, in the USA – 9%, in Germany – 8%.

The presence of ash in the fuel affects on its quality negatively, since ash reduces the amount of heat per unit mass of fuel. The smallest solid particles of ash are captured by the flow of flue gases and are carried away from the burner, forming fly ash, which pollutes and sometimes floods the convective heating surface.

During combustion of all types of fossil fuels, one of the most harmful products of combustion are NO_x oxides, which damage both the environment and human health.

Thus, one of the actual tasks in the development of new and operation of existing combustion devices

is to reduce the concentration of carbon and nitrogen oxides during the combustion products.

Reducing NO_x emissions from fuel combustion at TPPs plays an important role in reducing the total level of nitrogen oxides NO_x emitted into the atmosphere. When using methods to reduce NO_x in calculating the amount of NO₂, it should not be used the traditional percentage of NO₂ of the total amount of NO_x (10%), as this leads to very significant errors in the calculations.

One of the ways to reduce the concentration of nitrogen oxides NO_x is the stepwise combustion of a powdered coal mixture, in particular the "Over Fire Air" technology. The idea of this method is based on the fact that the main volume of air is supplied to powdered coal burners, and the rest of the air is supplied further along the height of the torch through special nozzles [10-15].

Mathematical model describing the process of heat and mass transfer during combustion of coal dust in the combustion chamber of the boiler BKZ-160 on Almaty thermal power plant

Many experimental and analytical studies are conducted under simplified conditions that differ from the actual conditions of the combustion process. For example, many of them are conducted under the conditions of burning large particles when they are burned in a large excess of air. Some researchers assumed that the temperature of the medium during the combustion process would not change, and the combustion would proceed in one of the extreme regimes: kinetic or diffuse. Such simplification of the combustion process misrepresents its essence and does not allow to determine the aerodynamics and heat transfer occurring in a real combustion chamber.

During the combustion of solid fuel in a powdered state, turbulent processes of heat and mass transfer of reacting components and products of their interaction occur in the combustion chamber. Equations based on the laws of mass and momentum conservation describe such processes. For reacting streams in which heat transfer processes and chemical reactions occur, it is necessary to solve the energy conservation equation and add the mixture components conservation equation or the mixture fractions conservation equation and their changes additionally. Turbulence is described by transport equations for turbulent characteristics.

The system of basic equations of the mathematical model used in this project to describe

the processes of turbulent heat and mass transfer during the combustion of solid fuel in a powdered state (powdered coal flame) [15-20]:

a) The mass conservation equation, or the continuity equation:

$$\frac{\partial \rho}{\partial \tau} = - \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i), \quad (1)$$

b) The law of conservation of momentum:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} (\rho u_i) &= - \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) + \\ &+ \frac{\partial}{\partial x_j} (\tau_{ij}) - \frac{\partial p}{\partial x_j} + \rho f_i \end{aligned}, \quad (2)$$

Here f_i is bulk forces, τ_{ij} is viscous stress tensor.

Turbulent flows are characterized by velocity pulsations that contribute to the mixing of transported characteristics, such as impulse, energy, and component concentration, and also cause fluctuations in these characteristics. Since the pulsations can be small in scale, but have a high frequency, directly calculating them is a very difficult task in practical technical calculations. Instead, the instantaneous (exact) determining equations can be averaged by the time, represented as an average over an ensemble, which leads to modified systems of equations that need less costs to solve.

However, the modified equations contain additional unknown variables. Therefore, additional turbulence models are necessary for their determination.

Many turbulence models used in computational practice are based on the concept of vortex (turbulent) viscosity. In contrast to molecular viscosity ν , turbulent viscosity ν_t is determined by the state of turbulence and does not relate to the properties of the fluid. Turbulent viscosity can vary greatly from point to point in space depending on the type of flow. Sometimes, when calculating turbulent flows, ν_t is assumed to be constant. However, such a rough description of turbulence is permissible in those cases where the value of turbulent transfer is not significant or the use of more complex structures seems to be unjustified.

In this project, the standard k-ε model of turbulence is used to describe turbulence.

c) Energy equation:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) = -\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i h) - \frac{\partial q_i^{\text{res}}}{\partial x_j} + \frac{\partial p}{\partial t} + u_i \frac{\partial p}{\partial x_i} + \tau_{ij} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} + S_q, \quad (3)$$

here h is enthalpy; q_i^{res} is energy flow density due to molecular heat transfer, S_q is energy source.

The source term S_q takes into account:

- heat flow due to convective exchange between particles and the gas phase – $S_{h,p}$;
- the combustion heat, which takes into account the presence of solid particles of powdered coal fuel in the total flow of the mixture – S_{abr} ;
- heat due to radiation – S_{str} , the contribution of which, in the flame zone, is about 90% or more to the full heat transfer.

Therefore, we have: $S_h = S_{str} + S_{abr} + S_{h,p}$

Heat exchange through radiation, as mentioned above, makes the maximum contribution during powdered coal fuel combustion in the combustion chambers of industrial boilers. In this regard, the simulation of radiant heat transfer in the study of heat and mass transfer in the combustion chambers is an important step in the calculation of heat exchange processes with physics and chemical transformations.

d) Conservation law for a substance component:

The concentrations of the mixture components in the element's volume are recorded through the corresponding balance ratio, which takes into account the physics and chemical processes that influence on the concentration change of these substances.

In the element's volume, the total mass is determined by the sum of the masses of all components involved in the chemical reaction of the coal particle combustion:

$$m = \sum_n m_n. \quad (4)$$

In general form the equation describing the concentration of the mixture components is written as follows:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho c_n) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i c_n) &= \\ &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\mu_{\text{eff}}}{\sigma_{c_{n,\text{eff}}}} \frac{\partial c_n}{\partial x_i} \right] + S_{c_n}, \end{aligned} \quad (5)$$

where S_{c_n} is source term, taking into account the contribution of chemical reactions to changes in the components concentration.

For multicomponent mixture, the source term is determined by the relation:

$$S_{c_n} = \sum \omega_{n,r}, \quad (6)$$

where $\omega_{n,r}$ is the speed of the chemical reaction, which is written as follows:

$$\omega_{n,r} = \frac{dc_{AB}}{dt} = k(T)c_A c_B.$$

The speed of the reaction depends on the temperature and concentrations of the substances A and B involved in the reaction (starting, intermediate, final products). The speed constant of the reaction $k(T)$ is written as an exponential temperature dependence in the form of the Arrhenius law:

$$k(T) = k_0 e^{-E/RT}, \quad (7)$$

where: k_0 is the constant, in the first approximation, is not dependent on temperature, E [kcal / mol] is activation energy, $R=1.986$ [kcal/mol·K] is universal gas constant.

Results of modeling the coal combustion process, using «Over Fire Air» technology

The combustion chamber of the BKZ-160 boiler (Figure 2a) has a design steam capacity of 160 t/h, at a pressure of 9.8 MPa and a superheat temperature of 540 °C. Thermal power of the combustion chamber is 124.4 MW. On the sides of the combustion chamber there are 4 blocks of straight-through slot burners, directed tangentially to the

central conventional circle. To study the influence of OFA, 3 modes were selected: 0%, 10% and 20% of the

total air volume supplied through injectors in the upper part of the combustion chamber (Figure 2b) [21-26].

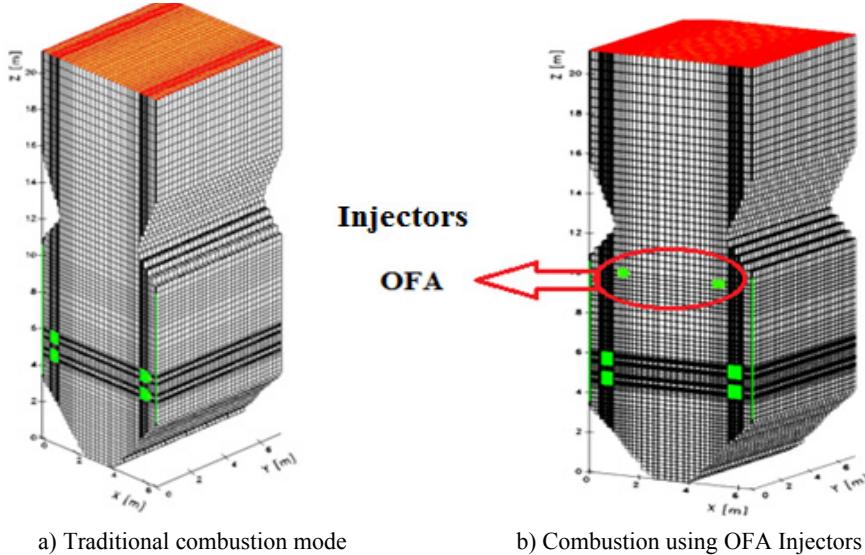


Figure 2 – General view of the combustion chamber of the BKZ-160 boiler and its division on control volumes

The location of the injectors applied to the “Over Fire Air” technology and the determination of the level where the secondary injected air mixes thoroughly (Figure 2b) are very important to create the conditions for the efficient combustion of coal powder.

Figures 3 and 4 show the results of computational experiments on the effect of OFA technology on the aerodynamics of flows in the combustion chamber of the BKZ-160 boiler. There is also comparison with the basic combustion mode of solid fuel, when there is no additional air supply (OFA = 0%).

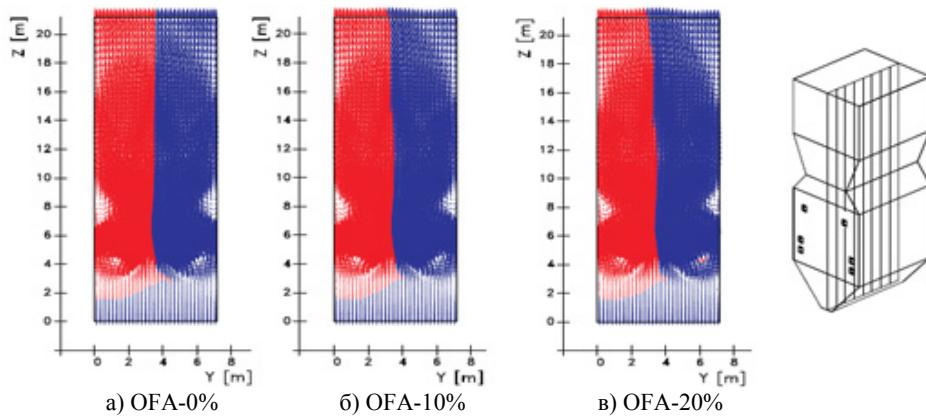


Figure 3 – The distribution of velocity vectors in the longitudinal section of the combustion chamber of the BKZ-160 boiler

Analysis of the figures shows that the use of OFA-injectors in the area above the combustion devices does not have a significant effect on the aerodynamic picture in longitudinal sections along

the height of the combustion chamber (Figure 3), i.e. it does not violate the general combustion mode of powdered coal and removal of combustion products from the combustion chamber.

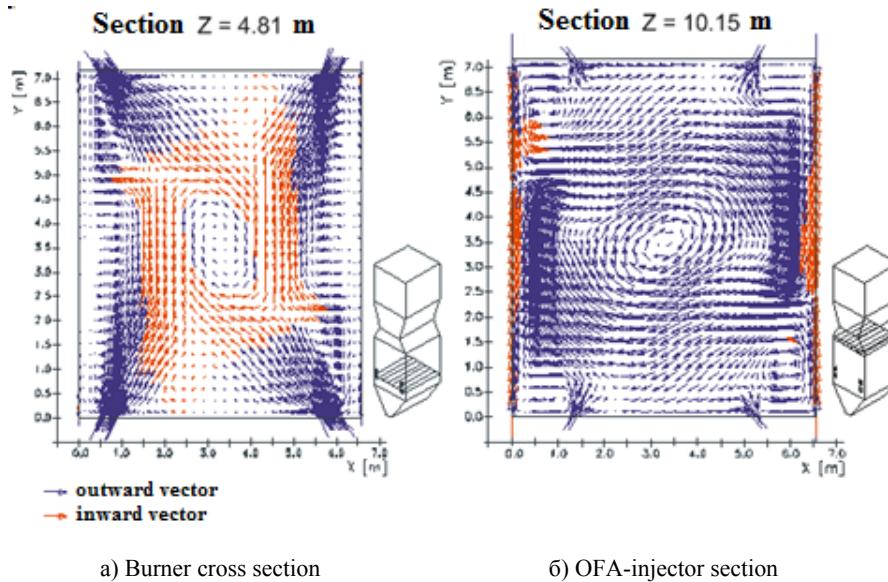


Figure 4 – The velocity vector field in the cross sections of the combustion chamber of the boiler BKZ-160

However, if we look at Figure 4, which shows the distribution of the velocity vector in the cross section of the installation of burners (Figure 4a) and in the cross section of the installation of OFA-injectors (Figure 4b), here we see that the supplying of an additional air amount through the OFA-injectors supports the vortex process of combustion. This affects favorably on the intensive mixing of the fuel and oxidizer, and, consequently, on the complete combustion of coal particles, which lead to a reduction in mechanical incombustion and in harmful dust and gas emissions, such as NO_x .

Conclusion

The study conducted a comprehensive study on the creation of energy-saving and environmentally friendly technologies (Over Fire Air technology) in order to increase the efficiency of thermal power plants and minimize harmful dust-gas emissions into the atmosphere when high-ash Ekibastuz coal is burned in the combustion chambers of the BKZ-160 power boilers.

The "Over Fire Air" technology has been described and applied to optimize the combustion of coal dust in combustion chambers. The methods for its implementation in power boilers of thermal power plants have been developed. The experience of foreign experts in reducing harmful emissions into the atmosphere have been studied.

The analysis of the "Over Fire Air" technology and the methods of Kazakhstan's energy fuel combustion were carried out taking into account its peculiarities, as well as the design features of the combustion chambers of operating TPPs industrial boilers. The existing technology "Over Fire Air" has been adapted and supplemented to a specific low-grade Kazakhstan fuel having an ash content of ~ 40-50%.

Various systems of staged air supply were investigated: the systems of separate (SOFA) and dual "sharp" blast (CCOFA). The aerodynamics of the flue space was obtained (the aerodynamic picture of introducing additional air streams into the chamber according to the Over Fire Air method and the velocity distribution in the combustion chamber).

References

- 1 Maksimov V. Yu., Messerle V. E., Ustimenko A. B., et al. Numerical simulation of the coal combustion process initiated by a plasma source // Thermophysics and aeromechanics. – 2014. – Vol. 21, Is. 6. – P. 747-754.
- 2 Askarova A., Karpenko E.I., Messerle V.E., et al. Plasma enhancement of combustion of solid fuels // Journal of High Energy Chemistry. – 2006. – Vol. 40, Is. 2. – P.111-118.
- 3 Messerle V. E., Ustimenko A.B., Gabitova Z. Kh., et al. Numerical simulation of pulverized coal combustion in a power boiler furnace // High temperature. – 2015. – Vol. 53, Is. 3. – P. 445-452.
- 4 Askarova A., Maximov V.Yu., Bekmukhamet A., Beketayeva M.T., et al. Computational method for investigation of solid fuel combustion in combustion chambers of a heat power plant // High temperature. – 2015. – Vol. 5, Is. 5. – P. 751-757.
- 5 Bekmukhamet A., Maximov V.Yu., Ospanova Sh.S., et al. Numerical research of aerodynamic characteristics of combustion chamber BKZ-75 mining thermal power station // Procedia Engineering. – 2012. – Vol.42. – P. 1250-1259.
- 6 Askarova A., Ospanova Sh., Bolegenova Symbat, Ergaliyeva A., et al. 3D 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. – P. 699-709.
- 7 Ergaliyeva A., Ustimenko A.B., Messerle V.E., et al. Reduction of noxious substance emissions at the pulverized fuel combustion in the combustor of the BKZ-160 boiler of the Almaty heat electropower station using the “Overfire Air” technology // Thermophysics and aeromechanics. – 2016. – Vol 23, Is. 1. – P. 125-134.
- 8 Askarova A., Gabitova Z., Bekmukhamet A., Beketayeva M., et al. Control of Harmful Emissions Concentration into the Atmosphere of Megacities of Kazakhstan Republic // International Conference on Future Information Engineering (FIE2014), IERI Procedia. – Beijing, PEOPLES R CHINA. – 2014. – P. 252-258.
- 9 Leithner R., Vockrodt S., Schiller A., et al. Firing technique measures for increased efficiency and minimization of toxic emissions in Kazakh coal firing // VDI, 19th German Conference on Flames, Germany, VDI Gesell Energietechn; Verein Deutsch Ing., Combustion And Incineration, VDI Berichte. – 1999. – Vol. 1492. – P. 93.
- 10 Müller H. Numerische Berechnung dreidimensionaler turbulenter Strömungen in Dampferzeugern mit Wärmeübergang und chemischen Reaktionen am Beispiel des SNCR-Verfahrens und der Kohleverbrennung // Fortschritt-Berichte VDI-Verlag. – 1992. – Vol. 6. – No. 268. – P. 158.
- 11 Leithner R. Energy Conversion Processes with CO₂-Separation Not Reducing Efficiency. Handbook of Combustion. Wiley VCH Verlag GmbH & Co. – 2010.
- 12 Epple B., Leithner R., Linzer W., Walter H. Simulation von Kraftwerken und wärmotechnischen Anlagen. – Springer. – 2009. – 702 p.
- 13 Patankar S.V. Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. – Hemisphere Publishing Corporation. – 1980. – 106 p.
- 14 Leschziner M.A. Practical Evaluation of three finite difference schemes for the Computation of Steady State Recirculation Flows // Computer Methods and Applied Mechanics an Engineering. – 1980. – Vol. 23. – P. 293-312.
- 15 Messerle V.E., Ustimenko A.B., Lavrichshev O.A. Comparative study of coal plasma gasification: Simulation and experiment // Fuel. – 2016. – Vol. 164. – P.172-179.
- 16 Karpenko E.I., Messerle V.E., Ustimenko A.B., et al. Mathematical modeling of the processes of solid fuel ignition and combustion at combustors of the power boilers // 7th International Fall Seminar on Propellants, Explosives and Pyrotechnics. – Xian. – 2007. – Vol. 7. – P. 672-683.
- 17 Buchmann M.A., Askarova A. Structure of the flame of fluidized-bed burners and combustion processes of high-ash coal // Gesell Energietech, Combustion and incineration – eighteenth dutch-german conference on flames, VDI Berichte. – 1997. – Vol. 1313. – P. 241-244.
- 18 Askarova A.S., Karpenko E.I., Messerle V.E., Ustimenko A.B., et al. Plasma-supported coal combustion in boiler furnace // IEEE Transactions on Plasma Science. – 2007. – Vol. 35, Is. 6, PART 1. – P.1607-1616.
- 19 Leithner R., Ergaliyeva A., Nugymanova A., et al. Computational modeling of heat and mass transfer processes in combustion chamber at power plant of Kazakhstan // MATEC Web of Conferences, 2016. – 5p.
- 20 Askarova A., Boranbayeva A., Bolegenova S., Berdikhan K., et al. Application of numerical methods for calculating the burning problems of coal-dust flame in real scale // International Journal of Applied Engineering Research. – 2016. – Vol. 11, Is. 8. – P. 5511-5515.
- 21 Askarova A., Bolegenova S., et al. Influence of boundary conditions to heat and mass transfer processes // Intern. Journal of Mechanics. – 2016. – Vol.10. – P. 320-325.
- 22 Gorokhovski M., Chtab-Desportes A., Voloshina I., et al. Stochastic simulation of the spray formation assisted by a high pressure // AIP Conference Proceedings. – Xian. – 2010. – Vol. 1207. – P. 66-73.
- 23 Askarova A., Beketayeva M., Ospanova Sh., Gabitova Z.K., et al. Investigation of turbulence characteristics of burning process of the solid fuel in BKZ 420 combustion chamber // WSEAS Transactions on Heat and Mass Transfer. – 2014. – Vol. 9. – P. 39-50.
- 24 Bolegenova S.A., Gabitova Z.K., Ospanova Sh.S., et al. Numerical modeling of turbulence characteristics of burning process of the solid fuel in BKZ-420-140-7c combustion chamber // International Journal of Mechanics. – ISSN: 1998-4448. – 2014. – Vol. 8. – P. 112-122.
- 25 Nugymanova A., Mazhrenova N., Manatbayev R., Berezovskaya I., et al. 3D modeling of heat and mass transfer processes during the combustion of liquid fuel // Bulgarian Chemical Communications. – 2016. – Special Is. E. – P. 229-235.
- 26 Safarik P., Maximov V., Beketayeva M., et al. Numerical Modeling of Pulverized Coal Combustion at Thermal Power Plant Boilers // Journal of thermal science. – 2015. – Vol. 24, Is. 3. – P. 275-282.

References

- 1 V. Yu. Maksimov et al., Thermophysics and aeromechanics. 21, 747-754 (2014).
- 2 A. Askarova et al., J. of High Energy Chemistry. 40, 111-118 (2006).
- 3 V. E. Messerle et al., High temperature. 53, 445-452 (2015).
- 4 A. Askarova et al., High temperature. 5, 751-757 (2015).
- 5 A. Bekmukhamet et al., Procedia Engineering (2012), 1250–1259.
- 6 A. Askarova et al., J. of Applied Fluid Mechanics. 699-709 (2016).
- 7 A. Ergaliyeva et al., Thermophysics and aeromechanics. 23, 125-134 (2016).
- 8 A. Askarova et al., Inter. Conference on Future Information Engineering (FIE2014), IERI Procedia (Beijing, 2014), p. 252-258.
- 9 R. Leithner et al., VDI, 19th German Conference on Flames, Germany, VDI Gesell Energietechn; Verein Deutsch Ing., Combustion And Incineration, VDI Berichte (Germany, 1999), p. 93.
- 10 Müller H. Fortschritt-Berichte VDI-Verlag (1992), p. 158.
- 11 R. Leithner, Energy Conversion Processes with CO₂-Separation Not Reducing Efficiency. Handbook of Combustion, (Wiley VCH Verlag GmbH & Co, 2010), 412 p.
- 12 B. Epple et al., Simulation von Kraftwerken und wärmetechnischen Anlagen (Springer, 2009), 702 p. ISBN 3211296956.
- 13 S.V. Patankar, Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, (Hemisphere Publishing Corporation, 1980), 106 p.
- 14 M.A. Leschziner, Computer Methods and Applied Mechanics an Engineering, 23, 293-312 (1980).
- 15 V.E. Messerle et al., Fuel, 164, 172-179 (2016).
- 16 E.I. Karpenko et al., 7th Inter. Fall Seminar on Propellants, Explosives and Pyrotechnics (Xian, 2007), p.672-683
- 17 M.A. Buchmann et al., Gesell Energietech, Combustion and incineration – eighteenth dutch-german conference on flames, VDI Berichte (1997), p.241-244.
- 18 A.S. Askarova et al., IEEE Transactions on Plasma Science (2007), p.1607-1616.
- 19 R. Leithner et al., MATEC Web of Conferences (2016). <https://doi.org/10.1051/matecconf/20167606001>.
- 20 A. Askarova et al., Inter. J. of Applied Engineering Research, 11, 5511-5515 (2016).
- 21 A. Askarova et al., Inter. J. of Mechanics, 10, 320-325 (2016).
- 22 M. Gorokhovski et al., AIP Conference Proceedings (Xian, 2010), p.66-73.
- 23 A. Askarova et al., WSEAS Transactions on Heat and Mass Transfer, 9, 39-50 (2014).
- 24 S.A. Bolegenova et al., Inter. J. of Mechanics, 8, 112-122 (2014).
- 25 A. Nugumanova et al., Bulgarian Chemical Communications, 229-235 (2016).
- 26 P. Safarik et al., J. of thermal science, 24, 275-282 (2015).

МРНТИ 61.53.19; 29.27.51

Baimuldin R.V.¹, Jankoski Z.²

¹IETP Al-Farabi Kazakh National University, Kazakhstan, Almaty, e-mail: rb0909@mail.ru

²University of Split, University Department of Professional Studies,
Department of Mechanical Engineering, Croatia, Split

PLASMA GASIFICATION OF SOLID FUELS

This article presents the results of thermodynamic analysis and experiments on plasma gasification of solid fuels from the example of Kuuchekinsky coal (KC). Thermodynamic calculations of plasma gasification showed that synthesis gas used in heat and power engineering, metallurgy and the chemical industry can be produced from solid fuels. Gasification (KC) allows to obtain synthesis gas with a maximum yield of 98.3% (CO – 43.5%, H₂ – 54.8%).

To perform thermodynamic analysis, the TERRA software package is used, which is designed for numerical calculations of high-temperature processes and has an extensive database of its own thermodynamic properties of 3000 individual substances. The program allows you to determine the equilibrium composition of the thermodynamic system (coal + oxidizer), consisting of 20 chemical elements. The calculation is carried out automatically within the data bank created during the program. The thermodynamic data bank contains properties of more than 3000 individual substances formed by 65 elements in the temperature range 300-6000 K.

Experimental researches of plasma gasification of coal in various gasification agents were carried out at the facility, which is a cylindrical plasma reactor with systems of electricity, water, steam, gas and fuel supply.

Key words: plasma torch, plasma reactor, coal, gasification.

Баймұлдин Р.В.¹, Янковски З.²

¹ӘТФЗИ, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті,
Қазақстан, Алматы к., е-mail: rb0909@mail.ru²

University of Split, Көсібі оқыту университеті, Машина жасау факультеті,
Хорватия, Сплит к.

Қатты отынның плазмалық газификациясы

Бұл мақалада термодинамикалық талдау жөне Күчеккин көмірінің мысалында қатты отынды плазмалық газдандыру бойынша эксперименттердің нәтижелері көлтірілген. Плазмадағы газдандырудың термодинамикалық есептері жылу жөне энергетикада, металлургияда жөне химия өнеркәсібінде қолданылатын синтез газы қатты отындардан алынуы мүмкін екенін көрсетті. Күчеккин көмірін газдандыру синтез газын 98,3% (CO – 43,5%, H₂ – 54,8%) ең жоғары өнімділікпен алуға мүмкіндік береді.

Термодинамикалық талдауды орындау үшін жоғары температуралық процестерді сандық, есептерге жөне 3000 жеке заттардың термодинамикалық қасиеттерінің кең дерекқорына ие TERRA бағдарламалық пакеті қолданылады. Бағдарлама 20 химиялық элементтен тұратын термодинамикалық, жүйенің (көмір + тотықтырғыш) тепе-тендік құрамын анықтауга мүмкіндік береді. Есептеу бағдарлама барысында жасалған деректер банкі ішінде автоматты түрде жүзеге асырылады. Термодинамикалық деректер банкі 300-6000 K температуралық диапазонында 65 элементтен құралған 3000-нан астам жеке заттардың қасиеттерін қамтиды.

Түйін сөздер: плазмалық алау, плазмалық реактор, көмір, газдандыру.

Баймудин Р.В.¹, Янковски З.²

²НИИЭТФ Казахский национальный университет им. аль-Фараби,
Казахстан, г. Алматы, e-mail: rb0909@mail.ru

²Университет Сплита, Университетский факультет профессиональных исследований,
факультет машиностроения, Хорватия, г. Сплит

Плазменная газификация твердых топлив

В этой статье представлены результаты термодинамического анализа и экспериментов по плазменной газификации твердых топлив на примере Куучекинского каменного угля (ККУ). Термодинамические расчеты плазменной газификации показали, что синтез-газ, используемый в теплоэнергетике, металлургии и химической промышленности, может производиться из твердых топлив. Газификация (ККУ) позволяет получать синтез-газ с максимальным выходом 98.3% (CO – 43.5%, H₂ – 54.8%).

Для выполнения термодинамического анализа используется программный комплекс TERRA, предназначенный для численных расчетов высокотемпературных процессов и обладающий обширной собственной базой данных термодинамических свойств 3000 индивидуальных веществ. Программа позволяет определить равновесный состав термодинамической системы (уголь + окислитель), состоящей из 20 химических элементов. Расчет осуществляется автоматически в пределах созданного при программе банка данных. В банке термодинамических данных записаны свойства более 3000 индивидуальных веществ, образованных 65 элементами, в интервале температур 300-6000 К.

Ключевые слова: плазмотрон, плазменный реактор, уголь, газификация.

Introduction

Since coal is one of the main sources of energy of the 21st century, much attention is paid to the problem of its efficient and environmentally friendly combustion throughout the world. Compared to other fossil fuels, coal reserves are approximately four times the oil reserves (estimated at 41 years) or gas reserves (at 67 years) [1].

The global energy industry at present and for the foreseeable future is focused on the use of fossil fuels, mainly low-grade coals. It should be noted that the deterioration of the quality of power coals is observed everywhere, and not only in the CIS countries, but also in developed European countries. Today in the world thermal power plants produce more than 40% of electrical and thermal energy. Despite the fact that in the whole history there have been ups and downs in the activity of using coal, it still remains one of the most important fuels for energy generation, especially electric. According to the statistics of 2011 [2], coal provides about 24% of thermal energy and produces about 40.6% of electricity in the world. At the same time, its use is expected to increase in the near future.

Direct combustion of low-grade coals with high ash content (40-50%), humidity (30-40%), sulfur content (1-3%) and low volatile yield (5-15%) in existing furnaces is associated with considerable difficulties from – due to deterioration of ignition and burnout of fuel, increase of mechanical burn and harmful dust and gas emissions (greenhouse gases,

ash, nitrogen oxides and sulfur). Suffice it to say that the problem of greenhouse gas emissions (carbon dioxide, methane, etc.) and the resulting general warming has now grown into a human problem related to global climate change on earth, flooding of vast land areas, desertification, etc.

Coal is a universal fuel because it can be burned, hydrolyzed and liquefied, gasified, or even used as a raw material for the chemical industry [3]. Coal is a fuel suitable for mining, transportation, storage and use, including in the form of dust [4]. Its compactness and high energy density (about 30 MJ/kg) intensifies the burning process [5]. There are no leakage and spatter problems associated with other fossil fuels, while explosions and self-ignition are not as dangerous as fuel oil or gas [6]. The widespread availability and significant reserves of coal make its price stable and attractive [7].

The use of coal in the modern world is diverse. It is used to produce electrical energy (thermal coal), as a raw material for metallurgical (coking coal) and chemical industry, to obtain rare-earth elements, for the production of graphite.

The projected resources of coal on Earth are currently more than 14.8 trillion tons, and world industrial reserves of coal – more than 1 trillion t, which significantly exceeds the reserves and resources of all other energy [8]. The global coal market is more competitive than oil and gas, since coal deposits exist on all continents, almost in all countries, and mining is carried out almost in all regions of the world.

The overwhelming number of long-term forecasts of the global fuel energy balance confirm that coal will remain the most significant of the available non-renewable energy sources until 2050. At the current level of consumption of these stocks will be enough for 250 years. For comparison, natural gas will be enough for 65 years and oil for 45 years. World coal consumption increases by about 2% per year and at the same time coal prices, unlike oil and gas, are highly stable.

Existing technologies of combustion and thermal processing of solid fuels and their mixtures do not fully meet modern requirements for improving the efficiency of fuel use and ensuring the environmental and economic indicators of energy facilities. Combustion of non-project low-grade coal in pulverized coal boilers presents significant difficulties, because poor fuel quality negatively affects the characteristics of the ignition process, stabilization of the flare combustion and the process of fuel combustion, and, in addition, significantly reduces the environmental and economic indicators of TPS due to the emission of harmful gases (NO_x, SO_x, CO) and fly ash [9].

The situation is exacerbated due to the fact that the reduction in the quality of power coals requires an increase in the consumption of fuel oil or natural gas in coal-fired TPS for kindling boilers, lighting the torch and stabilizing the output of liquid slag in furnaces with liquid slag removal [10,11]. For example, in countries such as Russia, Kazakhstan, and Ukraine, more than 15 million tons of fuel oil are spent annually on coal-fired power plants, which is economically inefficient.

Among the methods of coal processing, the processes of its full or partial gasification received considerable development. During coal gasification, thermochemical transformations can cover not only the organic, but also their mineral part, with the re-

sult that the target products are obtained from both organic and ash mass of coal [12]. The methods of partial gasification of low-grade fuels are based on the use of combustible gas obtained during gasification as a higher-reactive fuel than the original coal. In the case of complete gasification of coal in the air, a combustible gas (CO + H₂ + CH₄ + CO₂ + N₂) and an inert ash residue with a low carbon content are obtained. After separation of the solid residue, combustible gas can be burned in furnaces or used to illuminate a pulverized coal torch. When steam or steam-oxygen gasification of the coal receive synthesis gas (CO + H₂) and inert ash residue. After separation of ash, synthesis gas is used as an environmentally friendly fuel and reducing gas in metallurgy and for chemical syntheses [13].

Thermodynamic calculations

The industry of Kazakhstan ranks eighth in the world and third after Russia and Ukraine among the UIS countries in terms of the amount of coal extracted. The balance of the energy resources of Kazakhstan is mainly represented by black coal and to a lesser extent brown. On the territory of Kazakhstan there are large basins (Ekibastuz, Karaganda, Turgai) and deposits (Borlinskoe, Shubarkolskoe, Kuuchekinskoe).

The work used Kuuchekinsky coal (KC) with the following thermal characteristics:

Kuuchekinsky coal – Karaganda region, Kazakhstan:

$$\begin{aligned} W^w &= 7\%; A^c = 44\%; \\ V^{daf} &= 21\%; \\ Q_l^w &= 3960 \text{ kcal/kg} \end{aligned}$$

The composition of this solid fuel is given in the table 1.

Table 1 – Composition of Kuuchekinsky coal (on dry weight), wt.%

C	O	H	N	S	SiO ₂	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	CaO	MgO	K ₂ O+Na ₂ O
45,75	6,05	2,8	0,73	0,67	25,3	15,2	2,4	0,4	0,35	0,35

To perform thermodynamic analysis, the TERRA software package is used, which is designed for numerical calculations of high-temperature processes and has an extensive database of its own thermodynamic properties of 3000 individual substances. The program allows you to determine

the equilibrium composition of the thermodynamic system (coal + oxidizer), consisting of 20 chemical elements. The calculation is carried out automatically within the data bank created during the program. The thermodynamic data bank contains properties of more than 3000 individual substances formed by

65 elements in the temperature range 300-6000 K [14].

The calculations were performed for the following model mixture: coal + water vapor. The calculations were performed in the temperature range of 500–4000 K at atmospheric pressure. The criteria for selecting a model mixture were: the achievement of the degree of complete carbon gasification, the maximum yield of synthesis gas.

From Figure 1 it can be seen that the gas phase of the plasma gasification products of the KC is mainly represented by synthesis gas, the concentration of which reaches at 1500 K 98.3%. Moreover, the total concentration of atomic and molecular hydrogen is higher than the concentration of carbon monoxide in the entire temperature range and varies in the range of 48 – 58%. With increasing temperature, the concentration of carbon monoxide decreases from 43.5% at 1500 K and to 30% at 4000 K. The mineral components of coal are completely transferred to the gas phase at temperatures above 3200K (Figure 2).

One of the criteria for selecting a model mixture was to achieve the degree of complete carbon gasification (Figure 2), which is an important characteristic of the process. The degree of carbon gasification of coal is calculated by the formula:

$$X_c = \frac{C_{start} - C_{finish}}{C_{start}} \cdot 100\%,$$

where C_{start} and C_{finish} are initial and final concentrations of carbon in coal and solid residue, respectively.

Figure 3 shows the temperature dependence of the degree of gasification of carbon in the KC. It can be seen that the degree of gasification reaches 100% at a temperature of 1200 K.

The specific energy consumption (Fig. 4) was defined as the difference between the total enthalpy (the current process temperature) and the initial state of the system, reduced to 1 kg of the working substance (a mixture of KC and plasma-forming vapor). The specific energy consumption for the gasification process Q_{sp} increases with temperature throughout its range. For a temperature of $T = 1500$ K, at which the output of synthesis gas reaches its maximum (Fig. 1), the specific energy consumption for plasma gasification of the KC is 1.82 kWh/kg.

Experiment

Studies of plasma gasification of coal were carried out at an experimental facility (Figure 5),

which is a cylindrical plasma reactor with systems of electro-steam-gas-dust supply. The installation includes the following main technological units: plasma reactor 1, slag collector 4, gas and slag separation chamber 3, synthesis gas oxidation and cooling chambers 6, coal dust preparation and supply systems 9 and 10, steam generation and supply systems or gas (not shown in the figure). The power of the plasma reactor is regulated from 30 to 100 kW [15].

The combined type plasma reactor is a cylindrical water-cooled body with a lid. A graphite electrode and nozzles for feeding coal dust and an oxidizer are installed in the lid. The chamber of the plasma reactor is lined inside with graphite (thickness 0.02 m). The inner diameter of this chamber is 0.15 m, height – 0.3 m. Outside the camera is covered by an electromagnetic coil 2, and below – by a graphite diaphragm. The plasma reactor 1 is supplied with current from a 200 kW power supply through an inductive air choke. The electric arc ignites between graphite rod (diameter 0.02 m) and ring (diameter 0.15 m) electrodes. The distance between the rod and ring electrodes is 0.035m. The arc is localized in the electric arc zone of the reactor (the distance from the reactor lid is 0.15 m), covered outside by the electromagnetic coil 2, which ensures the rotation of the arc in a magnetic field. Figure 6 shows a photograph of the plasma reactor during testing.

The coal dust supply system includes a coal dust bunker 10 connected to two dust feeders 9, of which coal dust is fed through quartz tubes with rotating springs to the plasma reactor 1.

Obtained in the process of plasma gasification of the solid residue is removed in the slag collector 4. It is a water-cooled cylinder, inside of which is a sampler. Its diameter is 0.22 m, height – 0.56 m. The slag collector is lined with graphite. The synthesis gas cooling chambers 6 are water-cooled stainless steel cylinders, also lined with graphite.

The steam generator and the steam supply system are equipped with a superheater and insulated piping connected to the reactor. Heaters are installed on the water supply pipeline, additional sections of the superheater and control of the water supply using a water rotameter make it possible to obtain steam overheated to 140–160 °C and control its flow rate with high accuracy. This allows steam gasification in a given energy-efficient mode. In addition, in the case of supplying air to the reactor, an additional valve is provided, which is connected to an air compressor. Figure 7 shows a photograph of the reactor steam supply system.

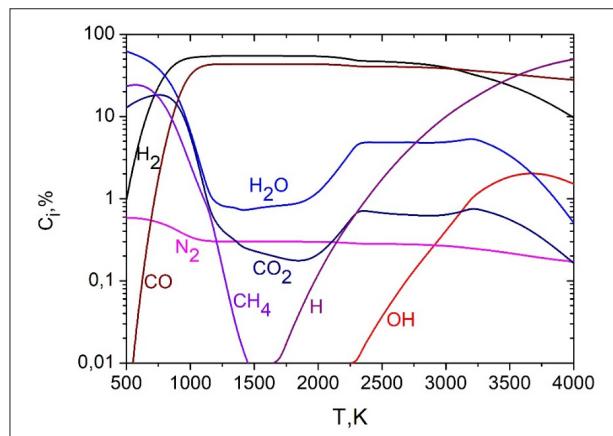


Figure 1 – The change in the concentration of the gas phase depending on the temperature of plasma gasification of the KC

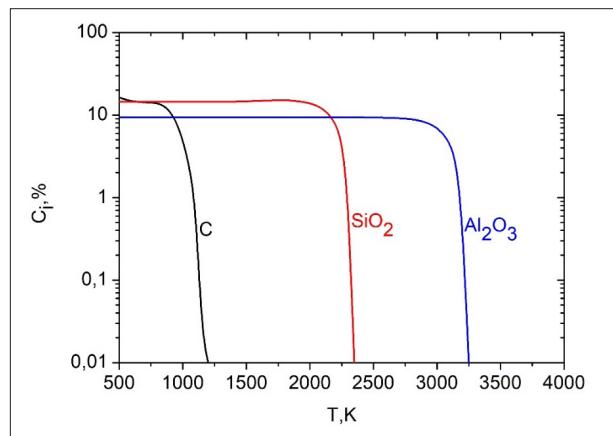


Figure 2 – Changes in the concentration of the condensed phase depending on the plasma gasification temperature of the KC

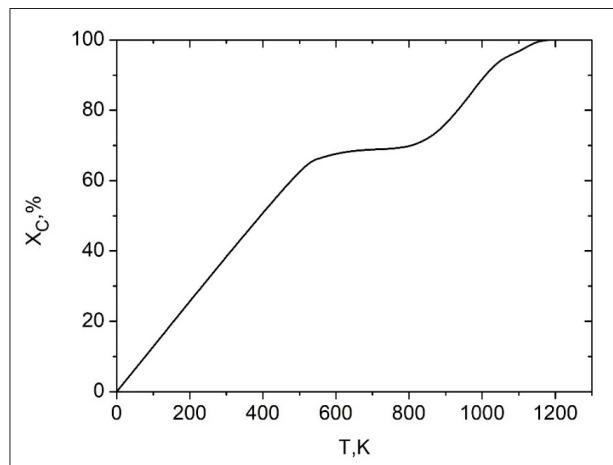


Figure 3 – The dependence of the degree of carbon gasification on the gasification temperature of the KC

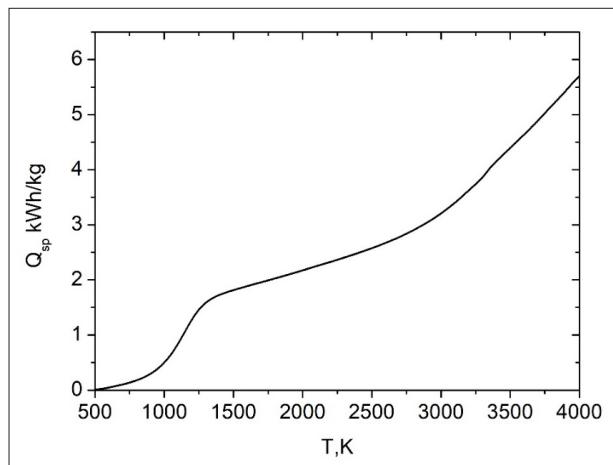
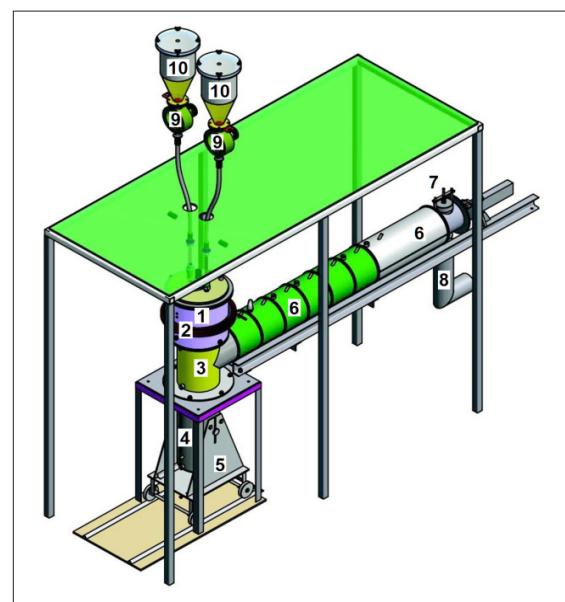


Figure 4 – Specific energy consumption for the plasma gasification process of the KC depending on temperature



1 – plasma reactor; 2 – electromagnetic coil, 3 – gas and slag separation chamber; 4 – slag collector; 5 – elevator slag collector; 6 – gas extraction and cooling sections; 7 – safety valve; 8 – synthesis gas outlet chamber; 9 – dust killer; 10 – dust bin

Figure 5 – Diagram of a universal installation for plasma fuel processing



Figure 6 – Plasma reactor with a rated power of 100 kW



Figure 7 – Reactor steam supply system

To cool all the main components of the experimental setup, exposed to high temperatures, is a water cooling system. It consists of a storage tank, pipelines, pumps, as well as a system of valves and rotameters.

The system of removal of combustible gas includes a lined with graphite oxidation chamber synthesis gas and its cooling in the form of separate sections 6 and the system output gas 7 and 8.

The slag removal system consists of a slag collector 4, equipped with a lift carriage 5.

The plasma gasification experiments were carried out according to the following procedure. The arc is ignited by the method of wire explosion in a plasma reactor. Then from the bunker through two ejectors installed on the reactor lid, coal dust is fed, after which water vapor is fed into the arc burning zone. With the help of steam the pulverized coal mixture is sprayed in the arc burning zone. The pulverized mixture enters the zone of an electric arc rotating in an electromagnetic field and heats up to high temperatures, forming a two-phase plasma flow, where the processes of thermochemical preparation and gasification of coal take place. The solid residue obtained in the process is removed to a slag collector. Gaseous products are fed through the gas and slag separation chamber into the synthesis gas cooling chamber. Then the gaseous products are discharged into the ventilation system.

Experimental studies of plasma gasification of the KC were performed using water vapor as a gasification agent. The experimental data are summarized in Table 2, from which it can be seen that in all experiments a high degree of coal conversion was achieved, varying from 93 to 95.6%.

From table 2 it can be seen that the consumption of coal was 4.0 kg/h, steam – from 1.92 to 2.4 kg/h. In this case, the currents on the arc ranged from 240 to 250 A, the voltage ranged from 270 to 300 V, and the electrical power of the plasma reactor was from 65 to 75 kW.

Sampling was carried out after the plasma reactor in the cooling sections of the synthesis gas. The proportion of carbon in the condensed products of plasma gasification of coal was determined by the absorption weight method. When determining total carbon by the absorption weight method, carbon dioxide formed during sample combustion is absorbed by ascarite (KOH or NaOH applied on asbestos)

Table 3 shows the measured values of the concentrations of gaseous plasma gasification products, the degree of coal gasification X_c and the mass-average temperatures T_{mass} . As can be seen from the table, during the gasification of coal, the main component of the gas phase is hydrogen with a concentration of 57.8%, and the second is CO with a concentration of 40%, which provides a significant synthesis gas yield of 98.2%.

Table 2 – Indicators of experiments on plasma gasification of the KC

experiment number	$G_{\text{coal}}, \text{kg/h}$	$G_{\text{steam}}, \text{kg/h}$	I, A	U, B	P, кВт	$X_c, \%$
1	4,0	2,4	250	300	75,0	95,6
2	4,0	1,92	240	270	64,8	93,7

Table 3 – Results of physico-chemical studies of the formation of the final gaseous and condensed products of plasma processing of the KC

experiment number	$T_{\text{mass}}, (\text{K})$	Consumption, kg/h		The composition of the synthesis gas, vol. %				$X_c, \%$
		coal	steam	H ₂	CO	N ₂	O ₂	
1	3550	4,0	2,4	57,8	40,4	1,8	0,0	95,6
2	3500	4,0	1,92	55,8	41,5	2,7	0,0	93,7

In experiments with steam gasification of coal, oxygen at the outlet of the installation is absent, which indicates the correct choice of the coal-oxidizer mass ratio. The concentration of the ballast gas – nitrogen in both experiments does not exceed 2.7% and is explained by the release of nitrogen from the fuel into the gas phase together with volatile coal. The total yield of synthesis gas reaches a significant value and amounts to 97.3% and 98.2% during steam gasification. The degree of coal gasification, determined by the residual carbon content in the collected condensed product (solid residue), reached high values of 93.7% and 95.6%. The value of the mass-average temperature changed slightly and amounted to 3500K and 3550K. With steam gasification of coal, the maximum hydrogen concentration in the synthesis gas (55.8-57.8%) is achieved with a very high degree of gasification.

Conclusion

– Thermodynamic analysis was performed using the TERRA universal thermodynamic calculation program.

– Calculations were performed in a wide temperature range (500 – 4000 K) at atmospheric pressure in a plasma gasifier for Kuuchekinsky coal.

– For the calculations, a model mixture of coal + water vapor widely used in practice was chosen.

– Calculations showed that in all cases, as a result of the full gasification process, synthesis gas is obtained, which, depending on the composition, can be used as an energy gas, a high-grade reducing gas in metallurgy, and a raw material for the synthesis of motor fuels.

– Numerical experiments have shown that the concentration of synthesis gas in the gasification products of the investigated coals during steam gasification is 98.3%. The yield of hydrogen is 54.8%.

– The experiments carried out confirmed the results of thermodynamic calculations of plasma-steam gasification of coal. The degree of coal gasification, determined by the residual carbon content in the collected condensed product (solid residue), reached high values of 93.7% and 95.6%.

– The Ministry of Education and Science of the Republic of Kazakhstan for targeted financing programs and grant financing projects (BR05236507, BR05236498, AP05130731 and AP05130031) financially supported this work.

References

- 1 Messerle V.E., Ustimenko A.B., Saarbruken, Germany: Plazmatrium Academic Publishing, 2012. – 404 c.
- 2 Алияров Б.К. Освоение сжигания экибастузского угля на тепловых электростанциях. – Алматы: Гылым, 1996. – 272 c.
- 3 Сакипов З.Б., Мессерле В.Е., Ибраев Ш.Ш. Электротермохимическая подготовка углей к сжиганию. – Алма-Ата: Наука, 1993. – 259 c.
- 4 Герасимов Г.Я., Макаров В.Н. // Материалы Всесоюзной конференции. – Новосибирск: ИТФ СО АН СССР, 1988. – С. 242 -246.

- 5 Pfender E. Thermal Plasma Technology: Where Do We Stand and Where Are We Going? //Plasma Chemistry and Plasma Processing. – 1999. – Vol.19, N1. – P.1- 31.
- 6 Qiu J., He X., Sun T., Zhao Z., Zhou Y., Guo S., Zhang J.and Ma T. //Fuel Processing Technology. – 2004. – N.85. – P. 969.
- 7 Жуков М.Ф., Урюков Б.А., Энгельшт В.С. и др. Теория термической электродуговой плазмы. – Новосибирск: Наука, 1987. – 287 с.
- 8 Карпенко Е.И., Мессерле В.Е. Плазменно-энергетические технологии топливоиспользования. – Новосибирск: Сиб. предприятие РАН «Наука», 1998. – 385 с.
- 9 Karpenko E., Lockwood F., Messerle V., Ustimenko A. //Proc. of the 6th Intern. Conf. on Technologies and Combustion for a Clean Environment "Clean Air". V. III. – Portugal, 2001. – P. 1465 -1468.
- 10 Янкоски З., Локвуд Ф., Мессерле В.Е., Карпенко Е.И., Устименко А.Б. Моделирование плазменной подготовки угольной пыли к сжиганию //Теплофизика и аэромеханика. – 2004. – Т. 11, № 3. – С. 473 – 486.
- 11 Сакипов З.Б., Мессерле В.Е., Рябинин В.П., Ибраев Ш. Ш. //Химия высоких энергий. – 1986. – Т. 20, № 1. – С. 61-67.
- 12 Карпенко Е.И., Мессерле В.Е., Устименко А.Б. – Улан-Удэ: ВСГТУ, 1995. – 33 с.
- 13 Карпенко Е.И., Мессерле В.Е. Энциклопедия низкотемпературной плазмы. – М.: Наука, 2000. – Т.4. – С. 359 – 370.
- 14 Gorokhovski M., Karpenko E.I., Lockwood F.C., Messerle V.E., Trusov B.G. and Ustimenko A.B. Plasma Technologies for Solid Fuels: Experiment and Theory. Journal of the Energy Institute // Journal of the Energy Institute. – 2005. – Vol.78, N 4. – P. 157-171.
- 15 Messerle V.E., Ustimenko A.B. and Lavrichshev O.A. Comparative study of coal plasma gasification: Simulation and experiment //Fuel. – 2016. – Vol.164. – P.172-179.
- 16 Messerle V.E., Ustimenko A.B. //BP Statistical Review of World Energy 2017. – June 2017. – 66th Edition. BP p.l.c. – P. 50.
- 17 Messerle V.E., Ustimenko A.B. Key World Energy Statistics 2017: International Energy Agency. OECD/IEA; – 2017. – P. 95.
- 18 Messerle V.E., Ustimenko A.B, Lavrichshev OA. Plasma coal conversion including mineral mass utilization //Fuel. – 2017. – Vol. 203. – P.877-883.
- 19 Messerle V.E., Ustimenko A.B. Plasma processing of uranium-containing solid fuels //Fuel. – 2019. – Vol.242. – P. 447-454.
- 20 Bublievsky A.F., Sagás J.C., Gorbunov A.V., Maciel H.S., Bublievsky D.A., Filho G.P., Lacava P.T., Halinouski A.A. and Testoni G.E. Similarity Relations of Power–Voltage Characteristics for Tornado Gliding Arc in Plasma-Assisted Combustion Processes //IEEE Trans. Plasma Sci. – 2015. – Vol. 43, N. 5. – P.1742–1746.
- 21 Surov A.V., Popov S.D., Popov V.E., Subbotin D.I., Serba E.O., Spodobin V.A., Nakonechny G.V. and Pavlov A.V. Multi-Gas Ac Plasma Torches For Gasification of Organic Substances //Fuel. – 2017. – Vol.203. – P.1007-1014.
- 22 Matveev I.B., Washcilenko N.V., Serbin S.I. and Goncharova N.A. Integrated Plasma Coal Gasification Power Plant //IEEE Trans. Plasma Sci. – 2013. – Vol. 41, N. 12. – P.3195-3200.
- 23 Messerle V.E., Karpenko E.I. and Ustimenko A.B. Plasma Assisted Power Coal Combustion in the Furnace of Utility Boiler: Numerical Modelling and Full-Scale Test //Fuel. – 2014. – Vol.126. –P.294-300.
- 24 Messerle V.E., Ustimenko A.B., Karpenko Yu.E., Chernetskii M.Yu., Dekterev A.A. and Filimonov S.A. Modeling and full-scale tests of vortex plasma-fuel systems for igniting high-ash power plant coal //Thermal Engineering. – 2015. – Vol. 62, N. 6. – P.442–451.
- 25 Karpenko E.I., Messerle V.E., Ustimenko A.B. and Lavrichshev O.A. Plasma preparation of coal to combustion in power boilers // Fuel Processing Technology. – 2013. – Vol.107. – P.93–98.

References

- 1 V.E. Messerle, A.B. Ustimenko, Saarbruken, (Germany: Plazmatrium Academic Publishing, 2012), 404.
- 2 B.K. Aliyarov Mastering the burning of Ekibastuz coal in thermal power plants, (Almaty, 1996), 272. (in Russ)
- 3 Z.B. Sakipov, V.E. Messerle, and Sh.Sh. Ibraev, Electrothermochemical preparation of coal for burning. (Almaty, Science, 1993), 259. (in Russ)
- 4 G.Ya. Gerasimov, V.N. Makarov, Materials of the All-Union Conference, (Novosibirsk, 1988), 242 -246. (in Russ)
- 5 E. Pfender, Plasma Chemistry and Plasma Processing, 19, 1, 1-31 (1999)
- 6 J. Qiu, X. He, T. Sun, Z. Zhao, Y. Zhou, S. Guo, J. Zhang and T. Ma, Fuel Processing Technology, 85, 969 (2004)
- 7 M.F. Zhukov, B.A. Uryukov, V.S. Engelsht, at al. Theory of thermal electric arc plasma. (Novosibirsk: Science, 1987), 287 p. (in Russ)
- 8 E.I. Karpenko, V.E. Messerle Plasma energy technologies of fuel use. (Novosibirsk: Science, 1998), 385. (in Russ)
- 9 E. Karpenko, F. Lockwood, V. Messerle, and A. Ustimenko Proc. of the 6th Intern. Conf. on Technologies and Combustion for a Clean Environment "Clean Air", Portugal, III, 1465 -1468 (2001).
- 10 Z. Jankoski, F. Lockwood, V.E. Messerle, E.I. Karpenko, and A.B. Ustimenko, Thermophysics and aeromechanics, 11 (3), 473-486 (2004). (in Russ)
- 11 Z.B. Sakipov, V.E. Messerle, V.P. Ryabinin, and Sh.Sh. Ibraev, High Energy Chemistry, 20 (1), 61-67 (1986). (in Russ)
- 12 E.I. Karpenko, V.E. Messerle, and A.B. Ustimenko (Ulan-Ude: VSSTU, 1995), 33 p. (in Russ)
- 13 E.I. Karpenko, V.E. Messerle, Encyclopedia of low-temperature plasma, (Science, 2000), 4, 359-370. (in Russ)
- 14 M. Gorokhovski, E.I. Karpenko, F.C. Lockwood, V.E. Messerle, B.G. Trusov and A.B. Ustimenko, Journal of the Energy Institute, 78 (4), 157-171 (2005).
- 15 V.E. Messerle, A.B. Ustimenko and O.A. Lavrichshev, Fuel, 164, 172-179 (2016).

- 16 V.E. Messerle, A.B. Ustimenko, BP Statistical Review of World Energy 2017, June 2017. 66th Edition. BP p.l.c.; p. 50. (2017).
- 17 V.E. Messerle, A.B. Ustimenko Key World Energy Statistics 2017: International Energy Agency. OECD/IEA; p. 95. (2017).
- 18 V.E. Messerle, A.B. Ustimenko and O.A. Lavrichshev, Fuel, 203, 877–883 (2017).
- 19 V.E. Messerle, and A.B. Ustimenko, Fuel, 242, 447-454 (2019).
- 20 A.F. Bublievsky, J.C. Sagás, A.V. Gorbunov, H.S. Maciel, D.A. Bublievsky, G.P. Filho, P.T. Lacava, A.A. Halinouski and G.E. Testoni, IEEE Trans. Plasma Sci., 43 (5), 1742 – 1746 (2015).
- 21 A.V. Surov, S.D. Popov, V.E. Popov, D.I. Subbotin, E.O. Serba, V.A. Spodobin, G.V. Nakonechny and A.V. Pavlov, Fuel, 203, 1007-1014 (2017)
- 22 I.B. Matveev, N.V. Washcilenko, S.I. Serbin and N.A. Goncharova, IEEE Trans. Plasma Sci., 41 (12), 3195–3200 (2013).
- 23 V.E. Messerle, E.I. Karpenko and A.B. Ustimenko, Fuel, 126, 294-300 (2014).
- 24 V.E. Messerle, A.B. Ustimenko, Yu.E. Karpenko, M.Yu. Chernetskii, A.A. Dekterev and S.A. Filimonov, Thermal Engineering, 62 (6), 442–451 (2015).
- 25 E.I. Karpenko, V.E. Messerle, A.B. Ustimenko and O.A. Lavrichshev, Fuel Processing Technology. 107, 93–98 (2013)

5-бөлім

ЖОҒАРЫ ОҚУ ОРНЫНДА

ФИЗИКАНЫ ОҚЫТУ ӘДІСТЕМЕСІ

Section 5

METHODS OF TEACHING

HIGH SCHOOL PHYSICS

Раздел 5

МЕТОДИКА ПРЕПОДАВАНИЯ ФИЗИКИ

В ВЫСШЕЙ ШКОЛЕ

**Дайнеко Е.А.^{1,2}, Ипалакова М.Т.¹, Цой Д.Д.¹, Бауржан Ж.Б.¹,
Елгонды Е.К.¹, Болатов Ж.Ж.¹**

¹Международный университет информационных технологий,

Казахстан, г. Алматы, e-mail: yevgeniyadaineko@gmail.com

²Институт прикладных наук и информационных технологий,

Казахстан, г. Алматы

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИИ ВИРТУАЛЬНОЙ РЕАЛЬНОСТИ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ ФИЗИКИ

С развитием информационных технологий развиваются и другие отрасли, становятся популярными совершенно иные, незнакомые прежде способы общения, творения, изучения чего-либо. Таким образом, современный мир предъявляет все более новые требования к процессу обучения. Однако, несмотря на развитие дистанционного и инклюзивного образования, естественные науки в силу своих особенностей отстают от других в сфере применения новых технологий. Это обусловлено тем, что для эффективного приобретения навыков работы с оборудованием и умения анализировать экспериментальные данные, физика, химия и прочие точные дисциплины требуют выполнения лабораторных работ. Однако для этого необходимы специально оборудованные лаборатории, которые не всегда укомплектованы в учебных заведениях. Тогда на помощь приходят новые технологии, такие как компьютерная графика, дополненная реальность, вычислительная динамика и пр.

В данной статье рассмотрено использование современных технологий в сфере образования. Проведен анализ внедрения различных инновационных разработок на базе виртуальной реальности в некоторые сферы современной жизни. В работе приведены преимущества и возможности применения образовательных ресурсов, основанных на виртуальной реальности, в образовании и, в частности, для изучения физики. Авторами представлен собственный программный продукт, позволяющий изучать физику с помощью виртуальной реальности. Подобный подход позволил сделать взаимодействие с приложением более интересным и запоминающимся, а обучение более эффективным. В качестве платформы разработки была выбрана межплатформенная среда Unity 3D. Основной функционал был написан на C#. Графические модели создавались при помощи Substance Painter. В статье рассмотрен процесс разработки представленного приложения, его функционал, а также пользовательский интерфейс.

Проделанная работа позволила авторам определить преимущества использования новых технологий в изучении физики и показала, что они открывают новые перспективы для их широкого применения на разных этапах обучения в учебных заведениях различных уровней. Этот подход помимо приведенных выше преимуществ делает процесс обучения безопасным, интересным и более доступным. В результате было получено не только программное обеспечение, но и новый опыт, который будет использоваться для дальнейшего развития и исследований.

Ключевые слова: Виртуальная реальность, unity 3D, leap motion, виртуальная физическая лаборатория, физика.

Daineko Ye.A.^{1,2}, Ipalakova M.T.¹, Tsot D.D.¹, Baurzhan Zh.B.¹,
Yelgondy Ye.K.¹, Bolatov Zh.Zh.¹

¹International University of Information Technologies,

Kazakhstan, Almaty, e-mail: yevgeniyadaineko@gmail.com

²Institute of Applied Sciences and Information Technologies, Kazakhstan, Almaty

The use of virtual reality technology in the studying of physics

With the development of information technology, other industries are also developing, completely new and unfamiliar ways of communication, creation, and learning are becoming popular. Thus, the modern world makes new demands on the learning process. However, despite the development of distance and inclusive education, the natural sciences due to their peculiarities lag behind other fields of science. This is due to the fact that in order to effectively acquire skills in working with equipment and the ability to analyze experimental data, physics, chemistry, and other exact sciences require executing laboratory works. However, this requires specially equipped laboratories that are not always staffed in educational institutions. Then, new technologies, such as computer graphics, augmented reality, computational dynamics and others come to the rescue.

This article discusses the use of modern technologies in the field of education. The analysis of the introduction of various innovative developments with the virtual reality into some spheres of modern life was also conducted. The work introduces the advantages and possibilities of using educational resources based on the virtual reality in education and, in particular, for studying physics. The authors present the software that allows studying physics with the help of virtual reality. Such approach made the interaction with the application more interesting and memorable, and learning more effective. As development platform the cross platform Unity 3D environment was chosen. The main functionality was written in C#. Graphic models were created using Substance Painter. Additionally, in the article the development process of the application was considered along with its functionality and user interface.

The work done allowed the authors to identify the advantages of using new technologies in the study of physics and showed that they open new prospects for their wide application at different stages of education in educational institutions of various levels. This approach in addition to the advantages mentioned above makes the learning process safe, interesting and more accessible. As a result, not only software was developed, but new experience was gained, which will be used for further development and research.

Key words: Augmented reality, virtual reality, unity 3D, leap motion, virtual physical laboratory, physics.

Дайнеко Е.А.^{1,2}, Ипалакова М.Т.¹, Цой Д.Д.¹, Бауржан Ж.Б.¹,
Елғонды Е. К.¹, Болатов Ж.Ж.¹

¹Халықаралық ақпараттық технологиялар университеті,

Қазақстан, Алматы қ., е-mail: yevgeniyadaineko@gmail.com

²Колданбалы ғылымдар және ақпараттық технологиялар институты,
Қазақстан, Алматы қ.

Физиканы оқыту үшін виртуалды шындық технологиясын қолдану

Ақпараттық технологиялардың дамуымен басқа да салалар дамиды, бұрын таныс емес қарым-қатынас, бірденені жасау, зерттеу әдістері танымал болады. Осылайша, заманауи әлем оқыту үдерісіне жаңа талаптар қояды. Алайда, қашықтықтан және инклюзивті білім берудің дамуына қарамастан, жаратылыстану ғылымдары өз ерекшеліктеріне байланысты жаңа технологияларды қолдану саласында басқа салалардан артта қалып отыр. Бұл, құрал-жабдықтармен жұмыс істеу дағдыларын тиімді менгеру және эксперименталды мәліметтерді талдау үшін физика, химия және басқа да нақты пәндер зертханалық жұмыстарды орындауды қажет ететіндігімен байланысты. Алайда бұл үшін арнайы жабдықталған зертханалар қажет, ал олармен әрдайым оқу орындары жабдықтала бермейді. Осы жағдайда көмекке компьютерлік графика, толықтырылған шындық, есептеу динамикасы және тағы да басқа жаңа технологиялар келеді.

Бұл мақалада білім беру саласындағы заманауи технологияларды пайдалану қарастырылған. Қазіргі өмірдің кейбір салаларына виртуалды шындық базасында түрлі инновациялық өзірлемелерді енгізуге талдау жүргізілді. Жұмыста виртуалды шындыққа негізделген білім беру ресурстарын оқу процесінде, атап айтқанда, физиканы зерттеу үшін, қолданудың артықшылықтары мен мүмкіндіктері көлтірілген. Авторлармен виртуалды шындық арқылы физиканы зерттеуге мүмкіндік беретін жеке бағдарламалық өнім ұсынылған. Мұндай тәсіл қосымшамен өзара қарым-қатынасты қызықты әрі есте қаларлық, ал оқу процесін неғұрлым

тиімді етуге мүмкіндік берді. Әзірлеу платформасы ретінде Unity 3D платформааралық ортасы таңдалды. Негізгі функционал C#-та жазылған. Графикалық модельдер Substance Painter көмегімен жасалды. Мақалада ұсынылған қосымшаларды әзірлеу процесі, оның функционалды, сондай-ақ пайдаланушы интерфейсі қарастырылған.

Атқарылған жұмыс авторларға физиканы зерттеуде жаңа технологияларды пайдаланудың артықшылықтарын анықтауға мүмкіндік берді және олар әртүрлі деңгейдегі оқу орындарындағы оқу процесінің әртүрлі кезеңдерінде оларды кеңінен қолдану үшін жаңа перспективаларды ашатының көрсетті. Бұл тәсіл жоғарыда көлтірілген артықшылықтардан басқа оқыту процесін қауіпсіз, қызықты және қолжетімді етеді. Нәтижесінде бағдарламалық қамтамасыз ету ғана емес, одан әрі даму мен зерттеу үшін пайдаланылатын жаңа тәжірибе алынды.

Түйін сөздер: толықтырылған шындық, виртуалды шындық, unity 3D, leap motion, виртуалды физикалық зертхана, физика.

Введение

Внедрение новых информационных технологий, наряду с компьютеризацией учебных заведений и инновационной деятельностью профессорско-преподавательского состава высших учебных заведений, являются основными направлениями комплексной модернизации образования, которым уделяется особое внимание не только во всем мире, но и в Казахстане [1, 2, 3, 4]. Примером тому является программа развития «Цифровой Казахстан», разработанная правительством Республики. Одной из целей данной программы является повышение цифровой грамотности населения, в том числе в среднем, техническом и профессиональном, а также высшем образовании, подготовка и переподготовка кадров. На сегодняшний день мы можем наблюдать мировую тенденцию – Индустрия 4.0 – по массовому внедрению киберфизических систем, таких как искусственный интеллект, виртуальная и дополненная реальность, квантовые вычисления, 3D печать, а также автономных роботов в производство и повседневную жизнь, включая и образование. На данную сферу информационные технологии также оказывают огромное влияние, причем не только со стороны компьютеризации всех бизнес-процессов высших и средних учебных заведений, как и любых организаций, но и со стороны внедрения новых методик и средств обучения, основывающихся на современных технологиях. В последнем направлении видное место занимают компьютерные обучающие системы, например, такие как виртуальные лаборатории, позволяющие проводить опыты при полном отсутствии реальной установки, в которых все процессы моделируются при помощи компьютера [5, 6].

В настоящее время восприятие изучаемого материала обучающимися может быть улучшено с помощью новых элементов визуализации и

жестов, которые предлагают современные цифровые технологии. В частности, с технологией виртуальной реальности (VR – Virtual Reality) на передний план выходят новые способы обучения, которые дают возможность раскрыть интерес обучающегося к изучаемому предмету, стимулируют позитивные эмоции, ускоряют процесс изучения и помогают лучшему усвоению. VR привносит в процесс обучения элемент игры, что, безусловно, позитивно сказывается на результатах обучающихся.

Так, в [7] рассматривается анализ виртуальной среды, используемой для изучения студентами вопросов развития туризма и связанных с ними воздействий. Виртуальная реальность используется для полного погружения студентами в окружающую среду. Данный подход способен предоставить участникам целостный опыт реальной окружающей среды, который в реальной действительности обходится дорого, в особенности для групп с большим количеством участников. Педагогическая ценность такого опыта достигается за счет погружения в среду, основанную на реальности, взаимодействия со сложными и неоднозначными ситуациями и информацией, а также взаимодействия с пространством, другими студентами и преподавателями. Результаты демонстрируют, что разработка подобных сложных виртуальных сред для обучения возможна, однако основная проблема заключается в достижении высокого уровня интерактивности.

Изучение и преподавание понятий алгебры часто сопровождается проблемами, как для студентов в плане понимания, так и для преподавателей в плане подачи материала. В [8] приведен пример курса, в котором изучение алгебры предлагается с помощью технологии виртуальной реальности. Авторами был разработан открытый образовательный ресурс Virtual Algebra Tiles, который дает возможность учащимся рас-

шириТЬ свои знания о понятиях алгебры, используя компьютер. Результаты показали, что такая система обучения для студентов является более комфортной, преобразуя процесс обучения в приятную задачу.

В [9] было проведено исследование, как одаренные студенты воспринимают виртуальные программы. Студенты были зачислены на виртуальный курс. Данные собирались через асинхронные фокус-группы на интерактивной доске обсуждений, с помощью наблюдений за синхронными занятиями в их виртуальном классе, а также индивидуальных интервью с участниками. Исследования показали, что возникали некоторые технические трудности в основном из-за ошибок оператора или неиспользования доступных инструментов. С точки зрения учебной программы и педагогики, участники увидели небольшую разницу между классическими и виртуальными классными комнатами. Можно сделать вывод, что для одаренных учеников качество содержания и обучения превосходит реальности сред обучения. Данная информация может быть использована в дальнейшем для улучшения качества on-line образования либо для создания новых образовательных ресурсов.

В статье [10] изучается восприятие преподавателей в отношении интеграции виртуальной реальности в процесс обучения с помощью тематического исследования на факультете информационных технологий (ИТ) в университете на Ближнем Востоке. Респонденты, опрошенные в этом исследовании, состояли из преподавателей. Был использован количественный метод: среди преподавателей ИТ в Интернете была распространена адаптированная анкета, которая оценивала их мнение о возможности применения виртуальной реальности как учебного пособия. Статистические методы были использованы для анализа данных анкет. Результаты, полученные на основе количественных данных, выявили готовность преподавателей использовать системы VR в качестве дополнительного обучающего инструмента, их намерение включить их в учебный процесс в будущем, барьеры на пути использования технологий, предварительные знания пользователей в области технологий. Результаты также показали, что обучение может быть максимально эффективным с интеграцией технологии VR. В статье также приведены рекомендации для облегчения использования технологии VR в качестве средства обучения.

Специально разработанная и протестированная среда обучения виртуальной реально-

сти [11] может предложить студентам-медикам средства доступа к учебным материалам и их повторного изучения, улучшая, таким образом, качество усвоения. Кроме того, использование таких средств обучения делает медицинское образование более доступным. В статье также показано, что виртуальная реальность (VR) обладает уникальным потенциалом для трансформации медицинского образования и предлагает увеличение инвестирования в развитие подобных технологий и возможность сотрудничества с разработчиками.

В [12] рассматривается использование технологий виртуальной реальности для получения информации об эвакуации, что является ключом к снижению травматизма и увеличению уровня выживания. Серьезные игры (Serious games (SGs)) на основе иммерсивной виртуальной реальности представляют собой инновационный подход к обучению и воспитанию людей в игровой среде. Данная статья направлена на понимание разработки и внедрения подобных серьезных игр в контексте обучения и исследований в области эвакуации зданий, применяемых к различным чрезвычайным ситуациям в помещении, таким как пожар и землетрясение. В [13] изучалась эффективность использования иммерсивной виртуальной реальности для изучения последствий изменения климата, в частности для изучения кислотности морской воды. Исследования показали, что после опыта погружения в виртуальную реальность люди продемонстрировали хороший уровень знаний, любознательность в области науки о климате, а в некоторых случаях показали более осознанное отношение к окружающей среде. Анализ также показал, что иммерсивная виртуальная реальность является многообещающим дополнительным механизмом для эффективного обучения, так как чем больше люди исследовали среду пространственного обучения, тем более высокий уровень знаний об изменении окружающей среды они демонстрировали. Кроме того, успехи в обучении были показаны при различных условиях: уровень участников (средняя школа, студенты колледжа, взрослые), степень (результаты обучения, отслеживание данных о движении в виртуальном мире, качественные ответы), и контент (были протестированы множественные версии об изменениях климата). Таким образом, иммерсивные виртуальные среды являются эффективным средством при изучении изменения климата.

В [14] рассматривается использование технологии виртуальной реальности для изучения архитектуры. Благодаря своей эмпирической природе технология VR может быть очень эффективна для получения архитектурного образования. Авторами разработано приложение LADUVR, которое пользователи могут использовать на строительной площадке для более внимательного изучения архитектурных деталей и проверить, что они узнали в интерактивной и захватывающей среде. Также в статье приведено сравнение между традиционными методами обучения и применением технологии виртуальной реальности.

Использование инновационных технологий в музейной деятельности, таких как технология виртуальной реальности, является актуальным, потому что данная технология позволяет представлять информацию в более наглядной, интересной и запоминающейся форме, в результате чего появляется возможность привлечь больше посетителей. В [15] предложено руководство по разработке образовательных игр в сотрудничестве с музеем. Авторы показали, что мини-образовательные игры с использованием технологии виртуальной реальности значительно помогают учащимся в изучении художественных концепций.

В данной статье представлен образовательный ресурс, реализованный в виде приложения с набором практических заданий для изучения физики с использованием технологии виртуальной реальности. Данное приложение разработано в Международном университете информационных технологий (Алматы, Казахстан).

Разработка виртуальной лаборатории по физике

Международный университет информационных технологий имеет опыт использования информационных технологий в учебном процессе. Например, по дисциплине «Физика» лабораторные работы выполняются виртуально с помощью разработанного авторами приложения. Моделирование физических экспериментов осуществляется в виртуальной среде [5]. Студенты имеют возможность задать начальные параметры и наблюдать физический процесс сколь угодно много раз.

Представленный в данной статье проект связан с применением виртуальной реальности в процессе изучения физики. Авторами было

создано приложение с набором практических заданий по физике с использованием VR. Разработанное приложение предоставляет доступ к физическим задачам по таким разделам, как кинематика, основы динамики, элементы статики, законы сохранения в механике, механические колебания и волны, молекулярная физика и термодинамика. Одной из отличительных особенностей предлагаемого приложения является его полиязычность. Пользователю предоставляется возможность выбора казахского, русского или английского языка взаимодействия с приложением. Следовательно, данный образовательный ресурс может применяться не только в Казахстане, но и за рубежом.

В данном проекте для разработки программного обеспечения использовалась межплатформенная среда разработки компьютерных игр игровой движок Unity 3D от компании Unity Technologies [16]. Приложение работает с проводным датчиком движения Leap Motion [17], предназначенным для ручного отслеживания в виртуальной реальности.

Представленное приложение виртуальной лаборатории с использованием Leap Motion состоит из компонентов, приведенных на рисунке 1. Структура состоит из Главного запуска, который открывает приложение и вызывает два следующих модуля: задачи по разделам «Механика», «Электростатика» и др. и задачи, с поддержкой контроллера Leap Motion. Пользователю виден лишь графический интерфейс, однако за ним скрываются еще три компонента: общая папка, содержащая модели, скрипты и другие необходимые ресурсы, отдельные папки для конкретной задачи и папка, необходимая для корректной работы Leap Motion.

Взаимодействие пользователя с приложением описывается на рисунке 2. Здесь приведены возможные действия, осуществляемые пользователем. Так, например, пользователь в начале работы должен подключить контроллер Leap Motion. Только после этого ему становится доступен весь функционал приложения. В нем он может выбрать задачу, посмотреть условие, решение, включить демонстрацию, а также изменять ее параметры. Все это происходит благодаря Menu Controller, так как именно с помощью него пользователь взаимодействует с приложением.

На рисунке 3 представлено главное меню приложения с интегрированным в него контроллером Leap Motion.

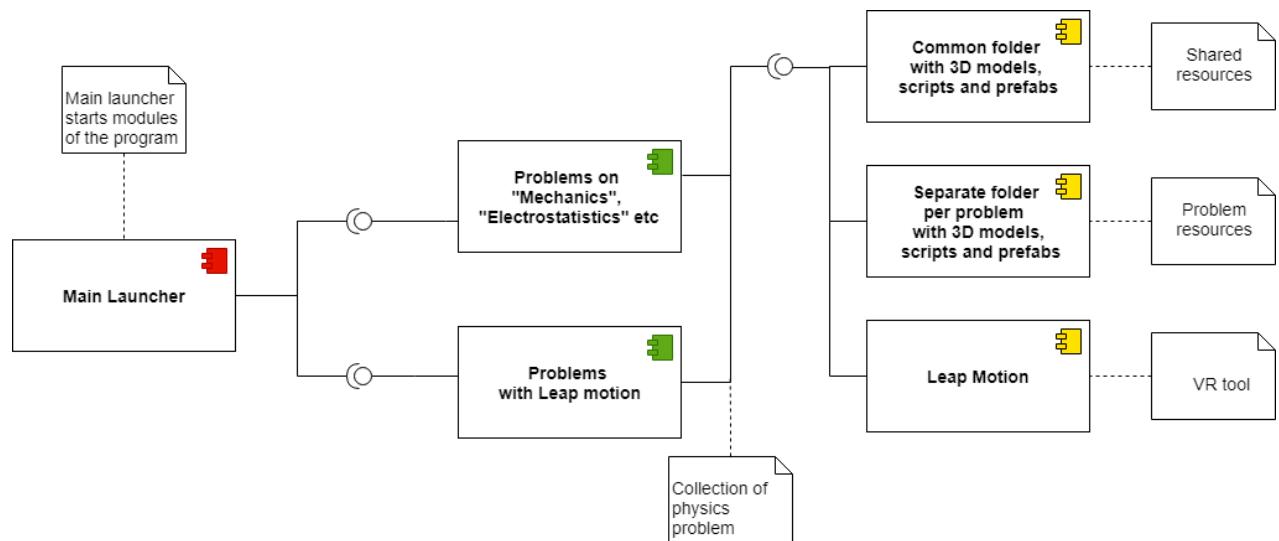


Рисунок 1 – Диаграмма компонентов приложения с Leap Motion

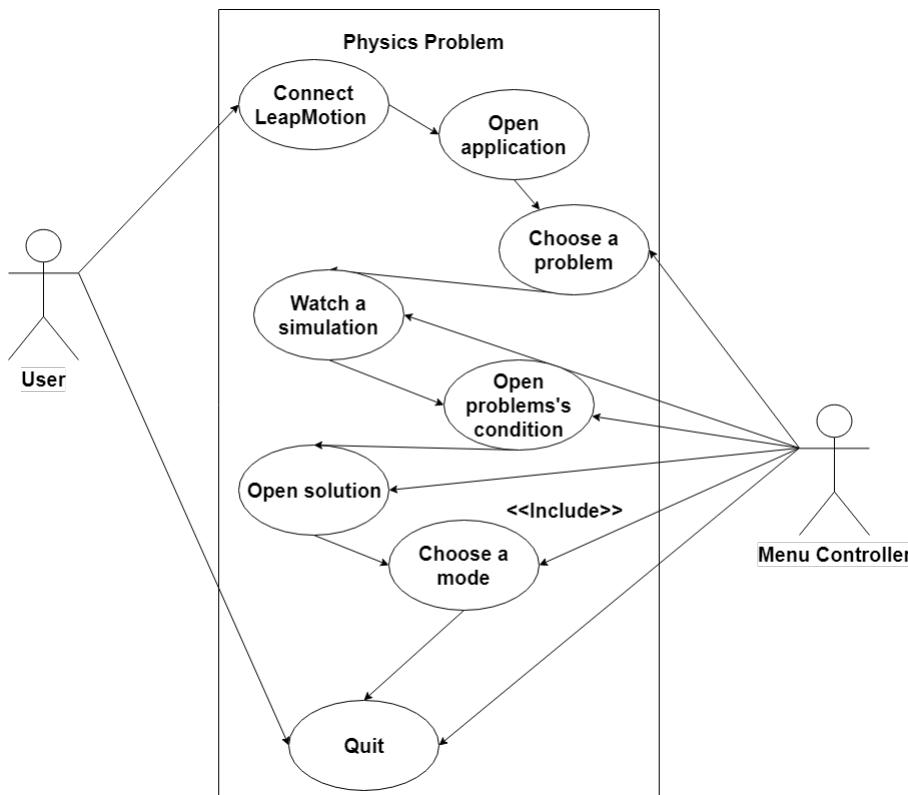


Рисунок 2 – Диаграмма вариантов использования

Каждая задача содержит условие, анимированную сцену задачи и решение. Рассмотрим пример реализации задачи с маятником. Условие задачи состоит в следующем: изменится ли период колебания математического

маятника, если его поместить в воду? Маятнику придана идеально обтекаемая форма, так что трением об воду можно пренебречь. Демонстрация эксперимента представлена на рисунке 4 (а, б).

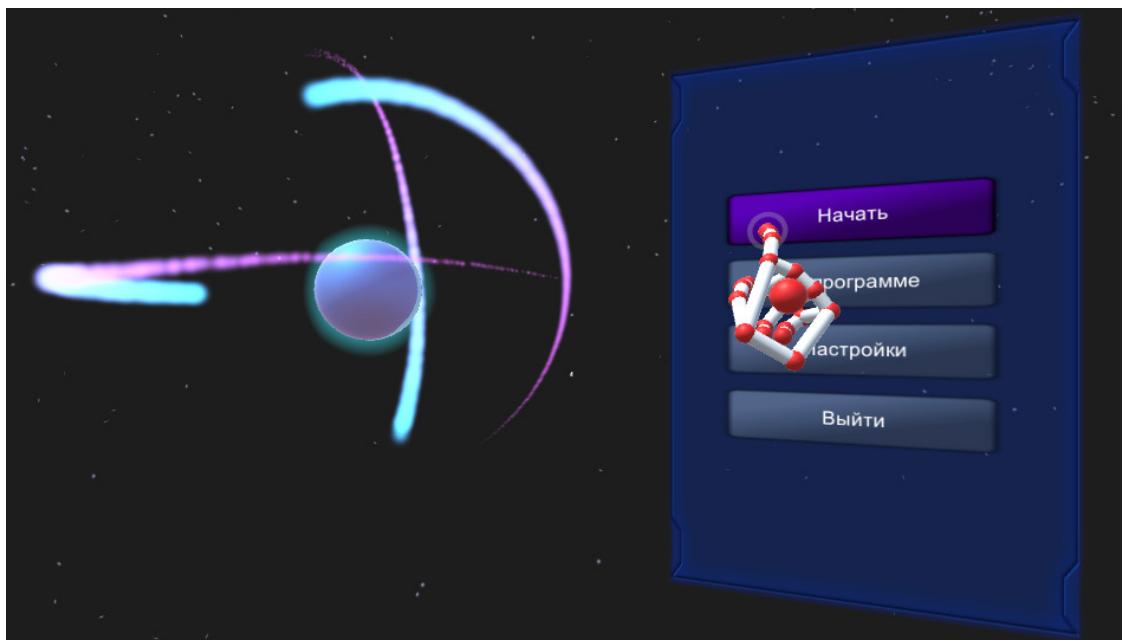


Рисунок 3 – Главное меню приложения с Leap Motion

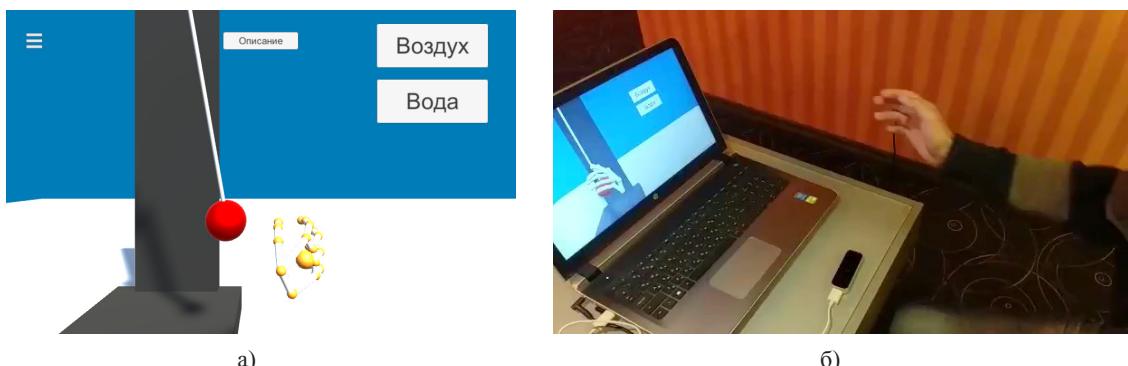


Рисунок 4 – Пример задачи с Leap Motion

Интерактивное управление организовано с помощью контроллера Leap Motion, клавиатуры и камеры обзора (управление мышкой), что позволяет также вращать 3D сцены в различных направлениях. Кроме того, программа позволяет увеличивать исследуемые объекты для более детального обзора. При изменении положений и точек обзора происходит обновление диалогового окна. Интерактивность в данной работе является основным преимуществом, обеспечивающим наглядность и быстрое усвоение изучаемого материала.

Заключение

Разработка представленного виртуального комплекса стала возможной благодаря развитию

современных информационных технологий. Их нынешний уровень позволяет воплощать самые разнообразные проекты, что открывает новые горизонты для создания обучающих ресурсов и инструментов на качественно другом уровне. С развитием технологий развивается и общество, что, в свою очередь, требует применения новых подходов в обучении. Таким образом, использование новейших технических средств помогает создавать совершенно другие, оригинальные по своей структуре обучающие программы, интересные нынешнему поколению студентов и учащихся иных учебных заведений. Полагаем, что созданная нами виртуальная лаборатория по дисциплине «Физика» есть программа, которая отвечает требованиям современности и является эффективной в изучении данного

предмета. В настоящее время авторами ведется постоянная работа по разработке новых практических заданий и их интеграции в состав лаборатории.

Благодарность. Работа выполнена при финансовой поддержке КН МОН РК по программе грантового финансирования научных исследований на 2018-2020 гг., грант №AP05135692.

Литература

- 1 Marmar Mukhopadhyay , Madhu Parhar. ICT in Indian Higher Education Administration and Management // ICT in Education in Global Context Part of the series Lecture Notes in Educational Technology. – 2014. – P. 263-283.
- 2 Chee-Kit Looi, W.L. David Hung. ICT-in-Education Policies and Implementation in Singapore and Other Asian Countries // Upon What Does the Turtle Stand? – 2005. – P. 27-39.
- 3 Uchenna R. Efobi, Evans S. Osabuohien. Technological Utilization in Africa: How Do Institutions Matter? //Technology and Innovation for Social Change. – 2014. – P. 67-84.
- 4 Samia Mohamed Nour. Overview of the Use of ICT and the Digital Divide in Sudan. Information and Communication Technology in Sudan. // Part of the series Contributions to Economics. – 2014. – P.127-266.
- 5 Daineko Ye., Dmitriyev V. and Ipalakova M. Using Virtual Laboratories in Teaching Natural Sciences: An Example of Physics // Computer Applications in Engineering Education. – 2017. – Vol.25, Iss.1. – P. 39-47.
- 6 Daineko, Y.A., Ipalakova, M.T., and Bolatov, Zh.Zh.. Employing Information Technologies Based on .NET XNA Framework for Developing a Virtual Physical Laboratory with Elements of 3D Computer Modeling // Programming and Computer Software, Volume 43, Issue 3, May 2017 – P. 161-171.
- 7 Christian Schott, Stephen Marshall. Virtual reality and situated experiential education: A conceptualization and exploratory trial // Journal of computer assisted learning. – 2018. – Vol.6, Iss. 34. – P. 843-852.
- 8 Juan Garzón, Julián Bautista. Virtual Algebra Tiles: A pedagogical tool to teach and learn algebra through geometry //Journal of computer assisted learning. – 2018. – Vol.6, Iss. 34. – P. 876-883.
- 9 Jessica Alison Potts. Profoundly Gifted Students' Perceptions of Virtual Classrooms. //Gifted child quarterly. – 2018. – Vol.63, Iss. 1. – P. 58-80.
- 10 Salsabeel F.M. Alfalah Education and information technologies, 23 (6), 2633-2653 (2018).
- 11 D. King, S. Tee, L. Falconer, C. Angell, D. Holley, A. Mills, Nurse Education Today, 71, 7–9 (2018).
- 12 Z. Fenga, V. A. González, R. Amorb, R. Lovreglioc, G. Cabrera-Guerrero, Computers & Education, 127, 252 (2018).
- 13 Markowitz DM, Laha R, Perone BP, Pea RD and Bailenson JN Immersive Virtual Reality Field Trips Facilitate Learning About Climate Change. //Front. Psychol. – 2018. – Vol.9. – P.2364.
- 14 Sayyed Amir Hossain Maghool, Seyed Hossein (Iradj) Moeini, Yasaman Arefazar //Archnet-IJAR. – 2018. – Vol.12, Iss.3. – P. 246-272.
- 15 Bossavit B., Pina A., Sanchez-Gil, I., & Urtasun, A. Educational Games to Enhance Museum Visits for Schools. //Educational Technology & Society. – 2018. – Vol.21 (4). –P.171–186.
- 16 <https://unity3d.com/company>
- 17 <https://www.leapmotion.com/>

References

- 1 Marmar Mukhopadhyay , Madhu Parhar, ICT in Education in Global Context Part of the series Lecture Notes in Educational Technology, 263-283 (2014).
- 2 Chee-Kit Looi, W.L. David Hung. ICT-in-Education Policies and Implementation in Singapore and Other Asian Countries. Upon What Does the Turtle Stand? 27-39 (2005).
- 3 Uchenna R. Efobi, Evans S. Osabuohien. Technological Utilization in Africa: How Do Institutions Matter? Technology and Innovation for Social Change, 67-84 (2014).
- 4 Samia Mohamed Nour, Overview of the Use of ICT and the Digital Divide in Sudan. Information and Communication Technology in Sudan, Part of the series Contributions to Economics, 127-266 (2014).
- 5 Ye. Daineko, V. Dmitriyev, and M. Ipalakova, Computer Applications in Engineering Education, 25 (1), 39-47 (2017).
- 6 Y.A. Daineko, M.T. Ipalakova, and Zh.Zh. Bolatov, Programming and Computer Software, 43 (3), 161-171 (2017).
- 7 C. Schott, S. Marshall, Journal of computer assisted learning, 6 (34), 843-852 (2018).
- 8 J. Garzón, J. Bautista, Journal of computer assisted learning, 6 (34), 876-883 (2018).
- 9 J.A. Potts, Gifted child quarterly, 63 (1), 58-80 (2018).
- 10 Salsabeel F. M. Alfalah, Education and information technologies, 23(6), 2633-2653 (2018).
- 11 D. King, S. Tee, L.Falconer, C. Angell, D. Holley, A. Mills, Nurse Education Today, 71, 7–9 (2018).
- 12 Z. Fenga, V. A. González, R. Amorb, R. Lovreglioc, G. Cabrera-Guerrero, Computers & Education, 127, 252–2 (2018).
- 13 D.M. Markowitz, R. Laha, B.P. Perone, R.D. Pea and J.N. Bailenson, Front. Psychol., 9, 2364 (2018)
- 14 Sayyed Amir Hossain Maghool, Seyed Hossein (Iradj) Moeini, Yasaman Arefazar Archnet-IJAR, 12 (3), 246-272 (2018).
- 15 B. Bossavit, A. Pina, I. Sanchez-Gil, & A. Urtasun, Educational Technology & Society, 21 (4), 171–186 (2018).
- 16 <https://unity3d.com/company>
- 17 <https://www.leapmotion.com/>

МЕРЕЙТОЙЛАР
ЮБИЛЕЙНЫЕ ДАТЫ
ANNIVERSARY DATES

**КАШКАРОВ ВАСИЛИЙ ПЕТРОВИЧ
(04.04.1919 – 27.09.1998)**

4 апреля 2019 года исполнилось бы 100 лет крупному казахстанскому учёному, специалисту в области теплофизики и гидродинамики, доктору физико-математических наук, профессору Кашкарову Василию Петровичу.



Кашкаров Василий Петрович родился 4 апреля 1919 года в селе Коксу, Гвардейского района, Талды-Курганской области в семье военнослужащего.

В 1938 г. после окончания средней школы, поступил на физико-математический факультет Казахского государственного университета имени С.М. Кирова.

В начале Великой Отечественной войны, осенью 1941 года, с четвертого курса ушел на фронт. В составе 40-овой отдельной стрелковой бригады оборонял Москву. После излечения в госпитале по обморожению воевал в Заполярье, на территории Украины, Белоруссии, Прибалтики,

Польши, Германии. Участвовал в штурме Берлина. Закончил войну в Чехословакии. Был награжден боевыми орденами и медалями.

Вернувшись в КазГУ, продолжил учебу и в 1947 году с отличием окончил университет, получив специальность физика-теоретика. В 1955 году, после окончания аспирантуры, защитил диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук на тему: «Некоторые автомодельные струйные движения вязкой несжимаемой жидкости». Работал старшим преподавателем, а затем доцентом кафедр теоретической физики, общей и молекулярной физики.

С 1965 по 1971 год В.П. Кашкаров работал проректором по науке Казахского государственного университета. В этот период он много сделал для укрепления материальной базы научных исследований в университете, подготовки специалистов высокой квалификации (кандидатов и докторов наук), установления и развития научных связей с другими вузами и научно-исследовательскими институтами СССР и других стран.

Докторская диссертация «Исследование тепло-и массообмена в струйных течениях» защищена им в институте теплофизики СО АН СССР в 1971 году. В этом же году В.П. Кашкарову присвоено звание профессора.

С января 1971 года и до последнего своего дня В.П. Кашкаров работал заведующим организованной им на физическом факультете КазГУ кафедры физической гидродинамики.

С 1972 по 1976 год он работал деканом физического факультета КазГУ имени С.М. Кирова.

В круг интересов В.П. Кашкарова входили многие области знания – вопросы общей теории относительности, механики жидкости

газа и плазмы, магнитной гидродинамики, теории гидродинамической устойчивости и неильтоновских жидкостей, проблемы теории горения, космонавтика, но основной вклад он внес в развитие теории ламинарных струйных течений. Его работы по исследованию струй жидкости с переменной вязкостью являются образцом теоретических работ по гидродинамике капельных жидкостей и представляют важный этап в развитии гидродинамики. Монографии «Теория струй вязкой жидкости», написанная им вместе с проф. Л.А. Вулисом, и «Тепло- и массообмен в струях вязкой жидкости», около 200 публикаций в научных изданиях СССР и других стран, составляют научное наследие профессора В.П. Кашкарова.

Работая преподавателем, заведующим кафедрой, деканом факультета, проректором университета, В.П. Кашкаров основной своей задачей считал обучение и воспитание студентов. Он разработал и читал студентам общий курс «Механика», новые спецкурсы: «Газовая динамика», «Теория пограничного слоя», «Магнитная гидродинамика», «Гидродинамика аномальных жидкостей» и др. По спецкурсам «Магнитной гидродинамики» и

«Гидродинамика аномальных жидкостей» им написаны методические пособия для студентов.

Сотни выпускников физического факультета КазГУ, слушая его лекции по курсу общей физики и спецкурсам, участвуя в работе семинаров, которыми он руководил, приобщались к физике.

В.П. Кашкаров внес весомый вклад в подготовку высококвалифицированных научно-педагогических кадров. Им было подготовлено 15 кандидатов наук. Продолжая научные исследования своего учителя, на кафедре теплофизики и молекулярной физики работают его ученики.

Мирный труд В.П. Кашкарова также отнесен правительственные наградами.

На досуге он увлекался музыкой, любил слушать оперу и вообще пение, сам хорошо играл на музыкальных инструментах. Увлекался фотографией, рыболовством. Любил активный отдых, который обычно проводил с семьей.

Профессор В.П. Кашкаров был доброжелательным, разносторонне развитым человеком, талантливым ученым, блестящим учителем и наставником, хорошим организатором, интеллигентным и порядочным человеком. Ушел из жизни 27 сентября 1988 года.

ТАКИБАЕВ НУРГАЛИ ЖАБАГАЕВИЧ

Такибаеву Нургали Жабагаевичу, доктору физико-математических наук, профессору, академику Национальной Академии Наук Республики Казахстан исполнилось 75 лет

В настоящее время профессор Такибаев Н.Ж. ведет активную научную и педагогическую деятельность в КазНУ им. аль-Фараби: читает лекции по специальным курсам теоретической физики, астрофизики и ядерной физики, является научным руководителем докторантов PhD и магистрантов, дважды получал звание «Лучший преподаватель ВУЗа». Его ученики с отличием защитили 3 кандидатские, 5 магистерских и 3 PhD диссертации.

Такибаев Н.Ж. уже многие годы является руководителем и исполнителем научных проектов и программ, выполняемых в рамках ПФИ МОН РК. Им опубликовано свыше 340 научных статей и работ, включая публикации в зарубежных высокорейтинговых научных журналах.

В 1999-2001 годах Такибаев Н.Ж. был главным ученым секретарем НАН РК и представителем Академии наук РК в AASA (Ассоциация Академий Наук Стран Азии). В 1993 г. он был принят в состав международного ученого совета Центра Фундаментальных Исследований (г. Маями, США), в состав международного ученого совета Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований (г.Дубна, Россия), был почетным профессором (Full Professor) Института фундаментальной физики (г.Молизе, Италия), профессором Института Продвинутых Знаний (г.Сеул, Южная Корея), с 2012 по 2016 годы был представителем Казахстана в ученом совете Азиатско-Тихоокеанского Центра по Теоретической Физике (APCTP).

Н.Ж. Такибаев родился 07.01.1944 г. в поселке Газелкент недалеко от Ташкента. Его раннее детство прошло в круглосуточном детском саду в Москве, поскольку его отец Такибаев Жабага Сулейменович был аспирантом ФИАН СССР им. Лебедева (он стал первым казахом –



доктором физико-математических наук), а мать Тлеубергенова Гульжан Аскаровна – студенткой Московского педагогического института имени Крупской. Закончив учебу, в начале 50-х годов, молодая семья переехала в Алма-Ату по приглашению президента Академии наук Казахстана знаменитого ученого-геолога Сатпаева К.И.

Н.Ж. Такибаев по окончании средней школы поступил в Московский Государственный Университет имени М.В. Ломоносова на физический факультет, который закончил в 1967 году. В 1968 г. он был призван в Советскую армию и так как в МГУ он прошел обучение по установкам противовоздушной обороны, его направили служить на границу Казахстана с

Китаем. Тогда там была напряженная обстановка в связи с событиями на острове Даманском.

После двух лет службы в армии Н.Ж. Такибаев в 1970-1972 прошел стажировку в ФИАНе и затем поступил в аспирантуру ФИАН СССР им. П.Н. Лебедева (Москва). В 1977 году он защитил кандидатскую диссертацию «Исследования по проблеме малого числа тел» по специальности теоретическая и математическая физика. В 1986 г. в отделе теоретической физики им. И.Е. Тамма, ФИАН СССР им. П.Н. Лебедева (Москва) Н.Ж. Такибаев защитил докторскую диссертацию «Унитарная формулировка многоканальной теории рассеяния» по той же специальности. Работал под руководством члена-корреспондента АН СССР Д.А. Киржница, руководителем отдела теоретической физики был академик

В.Л. Гинзбург, лауреат Нобелевской премии по физике 2003 года.

Н.Ж. Такибаевым были организованы и проводятся ежегодные Международные научные конференции и совещания по Ядерной физике и Астрофизике в КазНУ им. Аль-Фараби. Он является автором 3-х учебных пособий, нескольких монографий, соавтором нескольких книг по теоретической физике, одна из которых была написана и опубликована в США на английском языке.

Н.Ж. Такибаев как выдающийся ученый и организатор вносит большой вклад в развитие физической науки, образование и подготовку научных кадров, пользуется большим уважением и авторитетом среди коллег в Казахстане и за рубежом.

АРХИПОВ ЮРИЙ ВЯЧЕСЛАВОВИЧ

д.ф.-м.н., профессор

70 ЛЕТ



Архипов Юрий Вячеславович, родился 20 марта 1949 года в городе Семипалатинск Восточно-Казахстанской области. В 1972 году окончил физический факультет Казахского государственного университета им. С.М. Кирова, где позже поступил в очную аспирантуру при кафедре оптики и физики плазмы по специальности «Физика плазмы».

В 1983 году в г. Москве защитил кандидатскую диссертацию в Физическом институте им. П.Н. Лебедева на тему «Теоретическое исследование параметрической неустойчивости и турбулентности ионосферной плазмы» по специальности «01.04.08 – Физика плазмы». В 2003 году защитил докторскую диссертацию на тему «Тер-

модинамика и электродинамические свойства плотной высокотемпературной плазмы» по той же специальности.

С 1991 года Архипов Ю.В. активно занимается исследовательской деятельностью в НИИЭТФ при КазНУ им. аль-Фараби, пройдя все ступени от младшего научного сотрудника до главного научного сотрудника и руководителя научных тем, финансируемых МОН РК.

Архипов Ю.В. является высококвалифицированным специалистом в области физики неидеальной плазмы и одним из высокоцитируемых за рубежом ученых Казахстана, имеет свыше 150 научных публикаций, из них более 40 в зарубежных журналах с высоким импакт-фактором. Также является автором более 10 учебно-методических пособий по общей физике и физике плазмы, которые основаны на его оригинальных лекциях для студентов, магистрантов и докторантов PhD.

Под научным руководством Архипова Ю.В. были успешно защищены более 8 кандидатских диссертаций и докторских диссертаций PhD. Один из них, Аскарулы А., получил двойной диплом доктора PhD КазНУ им. аль-Фараби и Валенсийского политехнического университета.

За время работы на физико-техническом факультете Казахского Национального университета им. аль-Фараби работал заместителем декана по учебной работе, более 15 лет заведовал кафедрой «Физики плазмы, нанотехнологии и компьютерной физики», которая неоднократно занимала первые места, существенно перевыполняя показатели индикативного плана.

Архипов Ю.В. является членом оргкомитета ряда международных конференций, проводимых в Казахстане, членом редакционной коллегии журналов, рекомендуемых ККСОН для опубликования материалов диссертаций. В течении ряда лет являлся как членом, так и председате-

лем диссертационного совета по защите диссертаций PhD.

В 2007 и 2012 гг. Архипов Ю.В. удостоин звания «Лучший преподаватель ВУЗа» Республики Казахстан, а в 2010 году награжден почетным знаком МОН РК «За достижения и вклад в развитие науки РК». Заслуги Архипова Ю.В. в

области образования и науки отмечены в 2015 году высокой государственной наградой – орденом «Құрмет».

Профессорско-преподавательский состав физико-технического факультета высоко оценивает работу Архипова Ю.В. как высококвалифицированного ученого, преподавателя и организатора!

МАЗМҰНЫ – СОДЕРЖАНИЕ

1-бөлім Теориялық физика. Ядро және элементар бөлшектер физикасы. Астрофизика	Раздел 1 Теоретическая физика. Физика ядра и элементарных частиц. Астрофизика
<i>Джунушалиев В.Д., Нуртаева Г.К., Серикболова А.А.</i>	
Плоско-симметричные решения в $-aR^n$ гравитации	4
<i>Чечин Л.М., Курманов Е.Б.</i>	
О новом направлении в теории гравитационного линзирования	13
<i>Минглибаев М.Дж., Шомшекова С.А.</i>	
Статистический анализ экзопланетных систем по спектральным классам центральных звезд	20
2-бөлім Плазма физикасы	Раздел 2 Физика плазмы
<i>Исмагамбетова Т.Н., Габдуллин М.Т.</i>	
Парные корреляционные функции плотной водородной плазмы	30
3-бөлім Конденсирленген күй физикасы және материалтану проблемалары. Наноғылым	Раздел 3 Физика конденсированного состояния и проблемы материаловедения. Нанонаука
<i>Ағишинова Н.Ж., Мұрадов А.Д., Алджамбекова Г.Т.</i>	
Электронмен сәулелендірудің және күміспен қаптау процестерінің полимиидті үлдірлердің деформациялануына әсері	38
<i>Shongalova A., Muratov D., Rakhmetov B., Aimaganbetov K., Zhantuarov S.</i>	
On thermal stability of antimony thin films for solar cells applications	47
<i>Гладких Т., Козловский А.Л., Кенжина И., Канюков Е., Здоровец М.В.</i>	
Оптические и структурные свойства керамики AlN, облученных ионами C^{2+}	52
<i>Ибраев Е.С., Суюндыкова А.С., Партизан Г., Накысбеков Ж.Т.</i>	
Исследование нанопорошков металлов методом электронной микроскопии	58
<i>Ерланулы Е., Батрышев Д.Г., Хори Macapu</i>	
Синтез углеродных наностен методом химического осаждения из газовой фазы в плазме высокочастотного разряда	68
<i>Myasnikova L.N., Istdyau A.S., Sergeyev D.M.</i>	
Computer simulation of the density of the state of the NaF nanocrystal	74
<i>Мырзабекова М.М., Гусейнов Н.Р., Зайцев С.И., Шабельникова Я.Л., Муратов М.М., Мурадова С.Р., Турарбаева Т.Б.</i>	
Изучение параметров электронной литографии посредством ACM	81
4-бөлім Жылу физикасы және теориялық жылу техникасы	Раздел 3 Теплофизика и теоретическая теплотехника
<i>Askarova A.S., Bolegenova S.A., Maxsimov V.Yu., Bergaliyeva S.A., Bolado S.</i>	
Numerical simulation of fuel combustion processes to reduce harmful dust and gas emissions using Over Fire Air	92
<i>Baimuldin R.V., Jankoski Z.</i>	
Plasma gasification of solid fuels	101

5-бөлім Раздел 5
Жоғары оқу орнында физиканы **Методика преподавания физики**
окыту әдістемесі **в высшей школе**

Дайнеко Е.А., Иналакова М.Т., Цой Д.Д., Бауржан Ж.Б., Елғонды Е.К., Болатов Ж.Ж.
Использование технологии виртуальной реальности для изучения физики 112

Мерейтойлар – Юбилейные даты

Кашкаров Василий Петрович	120
Такибаев Нургали Жабагаевич	122
Архипов Юрий Вячеславович	124

CONTENTS

Section 1 Theoretical Physics. Nuclear and Elementary Particle Physics. Astrophysics

<i>Dzhunushalieva V., Nurtayeva G.K., Serikbolova A.A.</i>	
Flat-symmetric solutions in αR^n gravity	4
<i>Chechin L.M.I., Kurmanov E.B.</i>	
On the new direction in the theory of gravitational lensing.....	13
<i>Minglibayev M.Zh., Shomshekova S.A.</i>	
Statistical analysis of exoplanet systems by spectral classes of central stars	20

Section 2 Plasma Physics

<i>Ismagambetova T.N., Gabdullin M.T.</i>	
Pair correlation functions of a dense hydrogen plasma	30

Section 3 Condensed Matter Physics and Materials Science Problems. Nanoscience

<i>Agishanova N.Zh., Muradov A.D., Aldzhambekova G.T.</i>	
Influence of silver metallization and electron irradiation on the processes of mechanical deformation of polyimide films	38
<i>Shongalova A., Muratov D., Rakhatmetov B., Aimaganbetov K., Zhantuarov S.</i>	
On thermal stability of antimony thin films for solar cells applications.....	47
<i>Gladkikh T., Kozlovskiy A., Kenzhina I., Kanuikov E., Zdorovets M.</i>	
Optical and structural properties of AlN ceramics irradiated with C^{2+} ions	52
<i>Ibraev E.S., Suyundykova A.S., Partizan G., Nakysbekov Zh.T.</i>	
Investigation of metal nanopowders by the method of electron microscopy	58
<i>Yerlanuly Ye., Batryshev D.G., Hori M.</i>	
Synthesis of carbon nanowalls by the method of plasma enhanced chemical vapor deposition in a radio-frequency discharge plasma	68
<i>Myasnikova L.N., Istlyap A.S., Sergeyev D.M.</i>	
Computer simulation of the density of the state of the NaF nanocrystal.....	74
<i>Myrzabekova M.M., Guseinov N.R., Zaitsev S.I., Shabelnikova Ya.L., Muratov M.M., Muradova S.R., Turarbaeva T.B.</i>	
Study of the electron lithography parameters by AFM	81

Section 4 Thermal Physics and Theoretical Thermal Engineering

<i>Askarova A.S., Bolegenova S.A., Maxsimov V.Yu., Bergaliyeva S.A., Bolado S.</i>	
Numerical simulation of fuel combustion processes to reduce harmful dust and gas emissions using Over Fire Air.....	92
<i>Baimuldin R.V., Jankoski Z.</i>	
Plasma gasification of solid fuels.....	101

Section 5
Methods of teaching
high school physics

Daineko Ye.A., Ipalakova M.T., Tsoy D.D., Baurzhan Zh.B., Yelgondy Ye.K., Bolatov Zh.Zh.
The use of virtual reality technology in the studying of physics 112

Anniversary dates

Kashkarov Vasily Petrovich	120
Takibayev Nurgali Zhabagaevich	122
Arkhipov Yuriy Vyacheslavovich	124