

eISSN 2663-2276

ӘЛ-ФАРАБИ атындағы ҚАЗАҚ ҰЛТТЫҚ УНИВЕРСИТЕТІ

ХАБАРШЫ

Физика сериясы

КАЗАХСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ имени АЛЬ-ФАРАБИ

ВЕСТНИК

Серия физическая

AL-FARABI KAZAKH NATIONAL UNIVERSITY

RECENT CONTRIBUTIONS TO PHYSICS

№3 (74)

Алматы
«Қазақ университеті»
2020



ХАБАРШЫ

ФИЗИКА СЕРИЯСЫ №3 (74) қыркүйек

eISSN 2663-2276



04.05.2017 ж. Қазақстан Республикасының Ақпарат және коммуникация министрлігінде тіркелген

Қуәлік № 14498-Ж

*Журнал жылына 4 рет жарыққа шығады
(наурыз, маусым, қыркүйек, желтоқсан)*

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)

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

Асқарова Ә.С., ф.-м.ғ.д., профессор (Қазақстан)

Буртебаев 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)

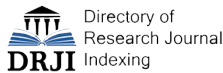
ТЕХНИКАЛЫҚ ХАТШЫ

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.



Министерство образования и науки
Республики Казахстан
Официальный интернет-ресурс
Комитета по контролю в сфере
образования и науки



Ғылыми басылымдар бөлімінің басшысы

Гульмира Шаккозова

Телефон: +7 747 125 6790

E-mail: Gulmira.Shakkozova@kaznu.kz

Редакторлары:

Гульмира Бекбердиева

Агила Хасанқызы

Компьютерде беттеген

Айгүл Алдашева

ИБ № 13795

Пішімі 60x84 1/8. Көлемі 7,6 б.т. Тапсырыс № 11398.

Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университетінің
«Қазақ университеті» баспа үйі.

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

«Қазақ университеті» баспа үйінің баспаханасында басылды.

© Әл-Фараби атындағы ҚазҰУ, 2020

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**

М.А. Жусупов¹ , К.А. Жаксыбекова¹ ,
Р.С. Кабатаева^{1,2,*} , А.С. Копенбаева¹ 

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

²Международный университет информационных технологий, Казахстан, г. Алматы,

*e-mail: raushan.kabatayeva@gmail.com

СПЕКТР ВОЗБУЖДЕНИЯ ЯДРА ^{10}B ПРИ ЗАХВАТЕ РЕАЛЬНЫХ И ВИРТУАЛЬНЫХ α -ЧАСТИЦ

В данной работе в рамках многочастичной модели оболочек выполнен расчет спектров возбуждения ядра ^{10}B в литиевых реакциях передачи тритонных и α -частичных кластеров, полученных суммированием соответствующих спектроскопических S -факторов. Показано, что различие спектров возбуждения ядра ^{10}B в литиевых реакциях передачи α -кластеров на ядре ^6Li и в реакции радиационного захвата $^6\text{Li}(\alpha, \gamma)^{10}\text{B}$ связано со структурными особенностями состояний ядра ^{10}B в околороговой области. В реакции (α, γ) на ядре ^6Li наблюдается резонансная структура сечений. Наблюдаемые резонансы связаны с малыми α -ширинами возбуждаемых состояний ядра ^{10}B . В качестве волновых функций основного состояния ядер $^6,7\text{Li}$, а также основного и возбужденных состояний ядра ^{10}B нами использовались хорошо известные волновые функции многочастичной модели оболочек, рассчитанные в НИИ ядерной физики МГУ им. М. Ломоносова.

Большой выход резонансных монохроматических γ -квантов с энергией $E_\gamma = 5.1639$ и $E_\gamma = 6.025$ МэВ в процессе на ядре ^6Li подтверждает возможность использования данной реакции для диагностики термоядерной плазмы путем добавления в нее определенного количества изотопов лития.

Ключевые слова: многочастичная модель оболочек, спектр возбуждения, легкие ядра, литиевые реакции, спектроскопический фактор, реальные α -частицы, виртуальные α -частицы, радиационный захват, передача кластера, ядро ^{10}B .

М.А. Zhusupov¹, К.А. Zhaksybekova¹, R.S. Kabatayeva^{1,2,*}, A.S. Kopenbayeva¹

¹Al-Farabi Kazakh National University, IETP, Kazakhstan, Almaty

²International Information Technology University, Kazakhstan, Almaty

*e-mail: raushan.kabatayeva@gmail.com

Excitation spectrum of ^{10}B nucleus when capturing real and virtual α -particles

In this paper within the multi-particle shell model the excitation spectra of ^{10}B nucleus in lithium reactions of triton and α -particle clusters transfer were calculated using the summation of the corresponding spectroscopic S -factors. It is shown that the difference between excitation spectra of ^{10}B nucleus in lithium reaction of α -cluster transfer and in the reaction of radiation capture $^6\text{Li}(\alpha, \gamma)^{10}\text{B}$ is due to the structural peculiarities of the states of ^{10}B nucleus in near threshold region. In (α, γ) reaction on ^6Li nucleus the resonance structure of cross sections is observed. The observable resonances are due to small α -widths of the excited states of ^{10}B nucleus. As the wave functions of the ground state of $^6,7\text{Li}$ nuclei, as well as the ground and excited states of the ^{10}B nucleus, we used the well-known wave functions of the many-particle shell model calculated at the Scientific Research Institute of Nuclear Physics, M. Lomonosov Moscow State University.

The large escape of resonance monochromatic γ -quanta with energy $E_\gamma = 5.1639$ and $E_\gamma = 6.025$ МэВ in the process on ^6Li nucleus confirms the possibility of use of the reaction for diagnostics of fusion plasma by adding a definite amount of lithium isotopes into the plasma.

Key words: multi-particle shell model, excitation spectrum, light nuclei, lithium reactions, spectroscopic factors, real α -particles, virtual α -particles, radiation capture, cluster transfer, ^{10}B nucleus.

М.Ә. Жүсіпов¹, К.А. Жақсыбекова¹, Р.С. Қабатаева^{1,2,*}, А.С. Көпенбаева¹

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

²Халықаралық ақпараттық технологиялар университеті, Қазақстан, Алматы қ.
e-mail: raushan.kabatayeva@gmail.com

Нақты және виртуалдық α -бөлшектерді қарпу кезіндегі ^{10}B ядросының қозу спектрі

Бұл ұсынылған жұмыста көп бөлшектік қабықшалар моделі шеңберінде сәйкес келетін спектроскоптық S -факторлардың қосумен алынған тритондық және α -бөлшектік кластер алмасу литий реакцияларындағы ^{10}B ядросының қозу спектрі есептелді.

Литий реакцияларында ^6Li ядросына α -кластерлерді беру және $^6\text{Li}(\alpha, \gamma) ^{10}\text{B}$ радиациялық қармау реакциясында, ^{10}B ядросының қозу спектрінің айырмашылығы табалдырыққа жақын жатқан ^{10}B ядросы күйлерінің қозу спектрінің ерекшеліктерімен байланысты екені көрсетілген. ^6Li ядросындағы (α, γ) реакциясында қиманың резонанстық құрылымы байқалады. Байқаланатын резонанстар ^{10}B ядросының қозатын күйлерінің кіші α -ендерімен байланысты. $^{6,7}\text{Li}$ ядроларының жер үсті күйінің толқындық функциялары, сондай-ақ ^{10}B ядросының жер үсті және қозған күйлері ретінде біз М. Ломоносов атындағы Мәскеу мемлекеттік университетінің Ядролық физика ғылыми-зерттеу институтында есептелген көп бөлшектердің қабықша моделінің танымал толқындық функцияларын қолдандық.

^6Li ядросы процесіндегі резонанстық монохроматтық энергиясы $E_\gamma = 5.1639$ және $E_\gamma = 6.025$ МэВ γ -кванттардың қарқын шығуы айтылған реакцияны термоядролық плазма диагностикасы үшін пайдалану мүмкін екенін растайды, литий изотоптарын нақты көлемде плазмаға қосу жағдайында.

Түйін сөздер: көп бөлшектік қабықшалар моделі, қозу спектрі, жеңіл ядролар, литий реакциялары, спектроскоптық фактор, нақты α -бөлшектер, виртуалдық α -бөлшектер, радиациялық қарпу, кластер алмасу, ^{10}B ядросы.

Введение

В многочастичной модели оболочек волновые функции ядра ^{10}B , находящегося в середине $1p$ -оболочки, являются многокомпонентными [1]. Так волновая функция основного состояния, имеющего полный спин, четность и изоспин $(J^\pi, T) = (3^+, 0)$, содержит 10 компонент. Они различаются значениями суммарного орбитального L и спинового S моментов и схемами Юнга, характеризующими пространственную симметрию орбитальной волновой функции. Для основного состояния ядра ^{10}B доминирующей является симметрия [442], допускающая виртуальное кластерное разбиение $\{\alpha\alpha d\}$. На эту схему Юнга приходится 91 % от веса полной волновой функции. На вес компоненты [433], допускающей разбиение $\{\alpha t\}$ ($t = ^3\text{He}$), приходится 3.2 % от веса полной волновой функции, максимальный вклад состояний со схемой Юнга [433] приходится на энергии возбуждения около 25 МэВ [1].

В данной работе для исследования кластерной структуры основного и возбужденных состояний ядра ^{10}B используются ядерные реакции с ионами $^{6,7}\text{Li}$ [2]. Из-за аномально малой энергии связи ядра ^6Li в $\alpha + d$ -канале, а ядра ^7Li в

$\alpha + t$ -канале в ядерных реакциях типа $^6\text{Li}(^6\text{Li}, d)^{10}\text{B}$ и $^7\text{Be}(^7\text{Li}, \alpha)^{10}\text{B}$ доминирующими механизмами являются передача α -частичного и тритонного виртуальных кластеров соответственно [3]. Как и ранее [4, 5], спектрам возбуждения остаточных ядер мы сопоставляем энергетические распределения спектроскопических S -факторов, вычисленных в многочастичной модели оболочек, то есть, используя выражение $\sigma \sim (2J + 1) \Sigma S_L$.

Особый интерес вызывает сравнение результатов расчета сечений в литиевых реакциях передачи виртуальных α -частиц с результатами расчетов радиационного захвата (α, γ) на ядре ^6Li , особенно в узкой околопороговой области, в которой последние имеют ярко выраженный резонансный характер [6–8]. Различие в поведении сечений связано со структурными особенностями уровней ядра ^{10}B в этой области энергий.

Спектры возбуждения ядра ^{10}B в литиевых реакциях

В таблице 1 даны рассчитанные значения суммарных спектроскопических факторов, нормированные на основное состояние. Сравнение

с экспериментальными данными [9] показывает, что теория в целом передает основные максимумы, наблюдаемые при энергиях $E = 7$,

11 и 13 МэВ для присоединения тритонов и при энергиях $E = 7, 11$ и 16 МэВ для α -частиц.

Таблица 1 – Спектры возбуждения ядра ^{10}B в литиевых реакциях

Уровни ^{10}B		S_L^L		$(2J+1) \sum S_L^L$ $^7\text{Be} + t \rightarrow ^{10}\text{B}^*$	S_α^L			$(2J+1) \sum S_L^\alpha$ $^6\text{Li} + \alpha \rightarrow ^{10}\text{B}^*$
$E, \text{МэВ}$	J, T	$L = 1$	$L = 3$		$L = 0$	$L = 2$	$L = 4$	
0...1	3, 0 1, 0	$2.1 \cdot 10^{-2}$ $7.1 \cdot 10^{-2}$	$2.2 \cdot 10^{-1}$ $1.1 \cdot 10^{-1}$	1 0.320	- $8.7 \cdot 10^{-2}$	$3.3 \cdot 10^{-3}$ $4.0 \cdot 10^{-1}$	$1.0 \cdot 10^{-2}$ -	1 15.69
1...2	0, 1	$1.3 \cdot 10^{-1}$	-	0.077	-	-	-	-
2...3	1, 0	$1.8 \cdot 10^{-1}$	$2.0 \cdot 10^{-2}$	0.355	$5.0 \cdot 10^{-1}$	$6.7 \cdot 10^{-2}$	-	18.27
3...4	2, 0	$1.4 \cdot 10^{-1}$	$2.4 \cdot 10^{-1}$	1.126	-	$2.5 \cdot 10^{-1}$	-	13.42
4...5	-	-	-	-	-	-	-	-
5...6	2, 1	$2.1 \cdot 10^{-1}$	$1.6 \cdot 10^{-2}$	0.669	-	-	-	-
6...7	3, 0 4, 0 2, 0	$1.1 \cdot 10^{-1}$ - $4.2 \cdot 10^{-2}$	$7.1 \cdot 10^{-2}$ $1.7 \cdot 10^{-1}$ $1.8 \cdot 10^{-2}$	1.830	- - -	$3.2 \cdot 10^{-1}$ - $2.3 \cdot 10^{-1}$	$2.9 \cdot 10^{-2}$ $6.8 \cdot 10^{-2}$ -	45.16
7...8	2, 1	$5.1 \cdot 10^{-2}$	$1.2 \cdot 10^{-1}$	0.506	-	-	-	-
8...9	-	-	-	-	-	-	-	-
9...10	-	-	-	-	-	-	-	-
10...11	2, 1 3, 0 1, 0 3, 1	$7.1 \cdot 10^{-2}$ $1.4 \cdot 10^{-1}$ $2.0 \cdot 10^{-2}$ $5.2 \cdot 10^{-6}$	$5.3 \cdot 10^{-3}$ $7.8 \cdot 10^{-3}$ $9.1 \cdot 10^{-2}$ $2.0 \cdot 10^{-1}$	1.860	- - $3.5 \cdot 10^{-5}$ -	- $1.4 \cdot 10^{-1}$ $1.0 \cdot 10^{-2}$ -	- $6.7 \cdot 10^{-2}$ - -	15.88
11...12	1, 1	$4.2 \cdot 10^{-3}$	$2.1 \cdot 10^{-5}$	0.007	-	-	-	-
12...13	4, 1 1, 1 2, 1	- $2.8 \cdot 10^{-1}$ $2.2 \cdot 10^{-1}$	$1.1 \cdot 10^{-1}$ $2.7 \cdot 10^{-5}$ $2.6 \cdot 10^{-3}$	1.744	- - -	- - -	- - -	-
13...14	2, 0 0, 1	$1.8 \cdot 10^{-2}$ $1.1 \cdot 10^{-1}$	$7.1 \cdot 10^{-2}$ -	0.328	- -	$1.1 \cdot 10^{-2}$ -	-	0.59
14...15	5, 0	-	-	-	-	-	$2.3 \cdot 10^{-1}$	27.17
15...16	2, 1 3, 0	$5.3 \cdot 10^{-2}$ $2.4 \cdot 10^{-3}$	$2.6 \cdot 10^{-3}$ $1.2 \cdot 10^{-1}$	0.672	-	- $1.4 \cdot 10^{-4}$	- $1.1 \cdot 10^{-1}$	8.28
16...17	0, 1 3, 1 4, 0	$5.1 \cdot 10^{-2}$ $1.0 \cdot 10^{-5}$ -	- $5.4 \cdot 10^{-3}$ $1.1 \cdot 10^{-1}$	0.639	- - -	- - -	- - $1.6 \cdot 10^{-1}$	15.46
17...18	2, 1	$6.1 \cdot 10^{-2}$	$7.1 \cdot 10^{-3}$	0.201	-	-	-	-
18...19	1, 0 3, 0 4, 1	$2.0 \cdot 10^{-1}$ $1.8 \cdot 10^{-2}$ -	$8.4 \cdot 10^{-5}$ $1.0 \cdot 10^{-2}$ $9.1 \cdot 10^{-2}$	0.957	$2.9 \cdot 10^{-3}$ - -	$2.3 \cdot 10^{-2}$ $1.4 \cdot 10^{-2}$ -	- $4.1 \cdot 10^{-4}$ -	1.91
19...20	1, 0 3, 1	$2.7 \cdot 10^{-2}$ $3.7 \cdot 10^{-5}$	$3.7 \cdot 10^{-3}$ $1.4 \cdot 10^{-1}$	0.635	$2.3 \cdot 10^{-2}$ -	$1.6 \cdot 10^{-2}$ -	- -	1.25

На рисунке 1а и б представлены спектры возбуждения ядра ^{10}B в реакциях $^7\text{Be}(^7\text{Li}, \alpha)^{10}\text{B}$ (передача тритонного кластера) и $^6\text{Li}(^6\text{Li}, d)^{10}\text{B}$ (передача α -кластера) соответственно.

В качестве волновых функций основного состояния ядер $^6,7\text{Li}$, а также основного и воз-

бужденных состояний ядра ^{10}B нами использовались хорошо известные волновые функции многочастичной модели оболочек, рассчитанные в НИИЯФ МГУ [1].

Волновые функции многочастичной модели оболочек проверены на успешных расчетах

различных структурных характеристик легких ядер. Они также применялись в расчетах различных ядерных реакций, успешно описывая различные механизмы. Основным достоинством

этой модели является возможность, исходя из единой волновой функции основного состояния, переходить в различные нуклонные и кластерные каналы.

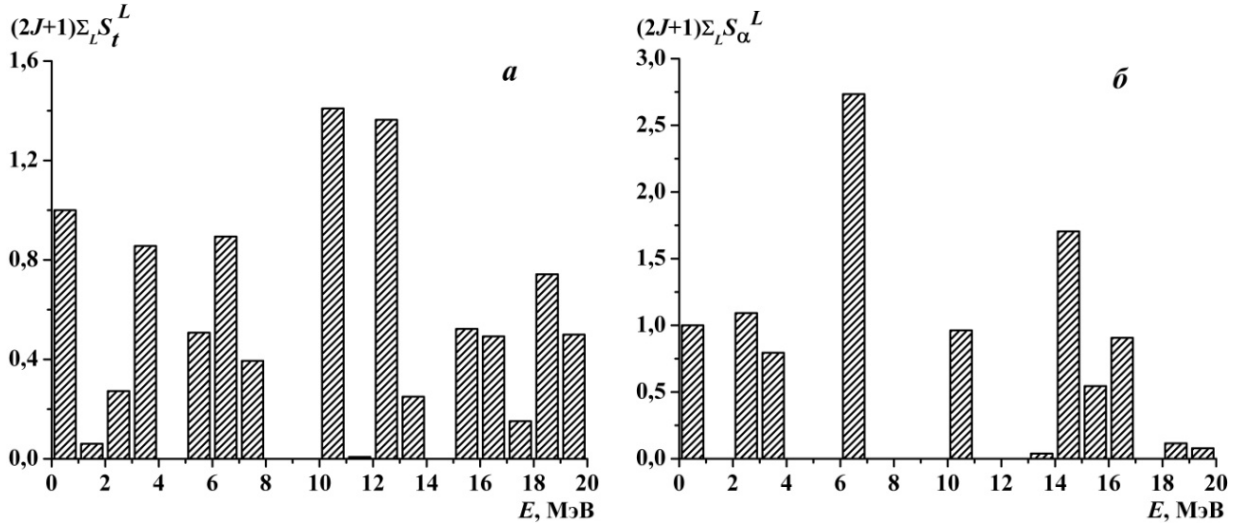


Рисунок 1 – Спектр возбуждения ядра ^{10}B в литиевых реакциях передачи кластеров: *a* – передача *t*-кластера, *б* – передача α -кластера

С целью изучения кластерной структуры ядра ^{10}B были рассмотрены реакции взаимодействия изотопов лития друг с другом, приводящие к основным и возбужденным состояниям ядра ^{10}B . Здесь используется тот факт, что основным механизмом в реакции с ионами лития является передача слабо связанных дейтронов, тритонов и α -частиц. Оказалось, что энергетическая зависимость спектров возбуждения хорошо передается просуммированными спектроскопическими факторами.

Сравнение сечений возбуждения ядра ^{10}B в реакциях захвата реальных и виртуальных α -частиц

Для расчета сечений вылета γ -квантов используется формула Брейта-Вигнера для одиночного резонанса, поскольку расстояние между соседними уровнями в этой области энергий больше полных ширин этих уровней. Полное сечение в резонансе ($E = E_0$) определится выражением [8]:

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \omega_\gamma \frac{1}{\Gamma},$$

где $\omega_\gamma = g \cdot \frac{\Gamma_\gamma \cdot \Gamma_\alpha}{\Gamma}$ – сила резонанса, *g* – фактор, учитывающий спины частиц.

Приведенная формула показывает, что сечение для вылета γ -кванта при возбуждении резонансного состояния будет тем больше, чем меньше полная ширина Γ . Это условие будет выполняться в том случае, если ширины для вылета α -частиц будут сравнимы с радиационными ширинами.

В таблице 2 [10] представлены полные резонансные сечения реакций радиационного захвата $^6\text{Li}(\alpha, \gamma)^{10}\text{B}$. В первом столбце приведены энергии α -частиц, при которых наблюдаются резонансы, в лабораторной системе и системе центра инерции. Во втором столбце указаны квантовые числа и энергии уровней. В третьем столбце приведены доминирующие мультиполи для электромагнитных переходов. В четвертом

столбце указаны энергии вылетающих γ -квантов, в пятом – силы резонансов, в шестом – полные ширины уровней, и в седьмом – приведены рассчитанные нами сечения реакции

радиационного захвата. Как видно из таблицы 2, в рассматриваемой энергетической области сила резонанса ω_γ более или менее плавно изменяется с энергией.

Таблица 2 – Экспериментальные характеристики и сечения образования резонансных γ -квантов в реакции $^6\text{Li}(\alpha, \gamma)^{10}\text{B}$

№	$E_{\alpha}^{\text{л.с.}}$ (рез.), МэВ ($E_{\alpha}^{\text{с.п.н.}}$ (рез.), МэВ)	$J_i^{\pi}; T_i \rightarrow J_f^{\pi}; T_f$, $E_i \rightarrow E_f$	Мультипольности доминирующих переходов	E_γ , МэВ	ω_γ , эВ	Γ , эВ	$\sigma_{\text{реакции}}$, мкб
1	1.085 (0.651)	$2^-; 0 \rightarrow 3^+; 0$, $5.1103 \rightarrow \text{g.s.}$	$E1, M2$	5.1103	$0.6 \cdot 10^{-1}$	$1.63 \cdot 10^3$	$3.6 \cdot 10^1$
2	1.173 (0.704)	$2^+; 1 \rightarrow 3^+; 0$, $5.1639 \rightarrow \text{g.s.}$	$M1, E2$	5.1639	$0.2 \cdot 10^{-1}$	2.868	$5.78 \cdot 10^3$
3	2.433 (1.459)	$2^+; 0 \rightarrow 3^+; 0$, $5.9195 \rightarrow \text{g.s.}$	$M1, E2$	5.9195	$1.9 \cdot 10^{-1}$	$1 \cdot 10^4$	8.42
4	2.609 (1.565)	$4^+; 0 \rightarrow 3^+; 0$, $6.0250 \rightarrow \text{g.s.}$	$M1, E2$	6.0250	$3.4 \cdot 10^{-1}$	$8 \cdot 10^1$	$1.758 \cdot 10^3$
5	4.022 (2.413)	$1^-; 0+1 \rightarrow 3^+; 0$, $6.873 \rightarrow \text{g.s.}$	$M2, E3$	6.8730	$4.8 \cdot 10^{-1}$	$2 \cdot 10^5$	$6.45 \cdot 10^{-1}$

Для реакции $^6\text{Li}(\alpha, \gamma)^{10}\text{B}$ наблюдаются четыре резонанса. Однако, в этом случае полные ширины Γ , как правило, гораздо больше, чем в радиационном захвате на ядре ^7Li [8]. Исключение составляет γ -распад с уровня $(2^+, 1)$ при $E = 5.1639$ МэВ на основное состояние. В этом случае малость Γ_α (и, следовательно, полной Γ) связана с малостью спектроскопического фактора для α -распада этого уровня.

Из-за правил отбора по изоспину распад возможен только за счет примеси к волновой функции уровня $(2^+, 1)$ компоненты с $T = 0$, возникающей за счет кулоновского смешивания уровней с $T = 0$ и $T = 1$ [9]. Структурное подавление α -распада из состояния $(4^+, 0)$ [1] приводит к сравнительно малому значению полной ширины (4 строка в таблице 2) и, как следствие, к большому сечению вылета γ -квантов с энергией $E_\gamma = 6.025$ МэВ. Структурное подавление α -распада из состояния $(4^+, 0)$ в ядре ^{10}B заключается в том, что основная компонента волновой функции ядра ^{10}B со схемой Юнга [442], дающая 70 % вклада в полную функцию [442] ^{13}F [1], не дает вклада в S_α -спектроскопический фактор для перехода к основному состоянию ядра ^6Li , главная компонента которого

имеет вид [42] ^{13}S [1]. Вклад в этот переход дает компонента [442] ^{13}G в волновой функции состояния $(4^+, 0)$ ядра ^{10}B . Из-за большого значения орбитального момента α -частицы $L_\alpha = 4$, парциальная Γ_α ширина сильно подавляется за счет фактора проницаемости центробежного барьера. Переход из состояния с энергией $E = 6.873$ МэВ на основное состояние (5 строка в таблице 2) демонстрирует наглядно, как большое значение полной ширины Γ , приводит к малым значениям сечения. В этом случае $\Gamma = \Gamma_\gamma + \Gamma_\alpha + \Gamma_d + \Gamma_p$ [11].

На рисунке 2 [10] представлены полные сечения реакции радиационного захвата в зависимости от энергии налетающих α -частиц.

Сравнивая рисунки 1 и 2, можно увидеть, что резонансы в реакциях радиационного захвата α -частиц изотопами лития ^6Li с образованием основного и возбужденных состояний изотопов бора ^{10}B и выходом монохроматических γ -квантов наблюдаются именно при тех энергиях, при которых соответствующий α -частичный S -фактор очень мал, поскольку спектроскопический S -фактор входит как множитель в формулу для парциальной ширины уровня [9].

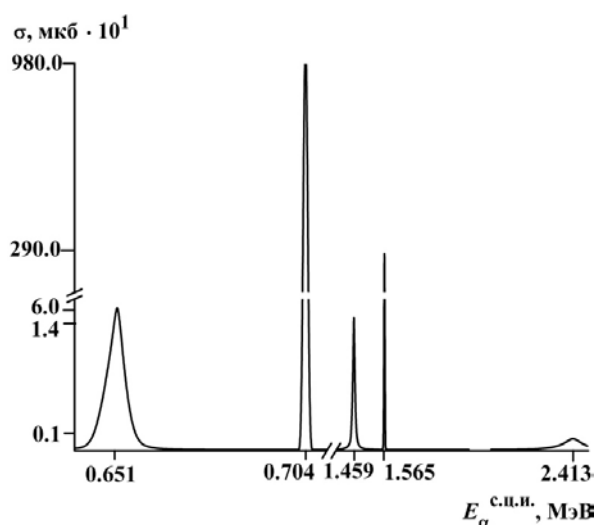


Рисунок 2 – Энергетическая зависимость полных сечений реакции ${}^6\text{Li}(\alpha, \gamma){}^{10}\text{B}$

Заключение

В реакции (α, γ) на ядре ${}^6\text{Li}$ наблюдается резонансная структура сечений. В этом случае резонансы связаны с малыми α -ширинами возбуждаемых состояний ядра ${}^{10}\text{B}$, что обусловлено их структурными особенностями. Так, особенно большим здесь является сечение для вылета γ -квантов с энергией $E_\gamma = 5.1639$ МэВ. В этом случае в процессе возбуждается состояние с квантовыми числами $(J^\pi, T) = (2^+, 1)$ и малость α -ширины является следствием правил отбора по изоспину.

Большой выход резонансных монохроматических γ -квантов с $E_\gamma = 5.1639$ и 6.025 МэВ в процессе на ядре ${}^6\text{Li}$ подтверждает возможность использования данной реакции для диагностики термоядерной плазмы путем добавления в нее определенного количества изотопов лития [6, 8].

Работа выполнена при поддержке гранта Комитета науки министерства образования и науки РК № AP05132952.

Литература

- 1 Бояркина А.Н. Структура ядер 1p-оболочки. – М.: Изд-во МГУ, 1973. – 62 с.
- 2 Zhusupov M.A., Zhaksybekova K.A., Kabatayeva R.S. Cluster structure of ${}^{10}\text{B}$ nucleus levels //Book of abstracts, LXIX International conference “Nucleus-2019” on nuclear spectroscopy and nuclear structure. 1-5 July, 2019. – P. 300.
- 3 Оглоблин А.А. Реакции передачи с ионами лития // ЭЧАЯ. 1972. – Т. 3, Вып. 4. – С.936.
- 4 Жусупов М.А., Кабатаева Р.С. Мультикластерная структура основного и возбужденных состояний ядра ${}^9\text{Be}$ //Изв. РАН. Сер. физ. – 2012. – Т. 76, № 4. – С. 485.
- 5 Zhusupov M.A., Zhaksybekova K.A., Kabatayeva R.S. and Kopenbayeva A.S. Cluster structure of the ground and excited states of ${}^9\text{Be}$ and ${}^{10}\text{B}$ Nuclei //In book: Recent Progress in Few-Body Physics. – 2020. – P.259-262.
- 6 Cecil F.E. et al. Nuclear reaction diagnostics of fast confined and escaping alpha particles //Rev. Sci. Instrum. – 1988. – V. 57, № 8. – P. 1777.
- 7 Ворончев В.Т., Кукулин В.И. Ядерно-физические аспекты УТС: анализ перспективных топлив и гамма-лучевая диагностика горячей плазмы //ЯФ. – 2000. – Т. 63, № 12. – С. 2147-2162.
- 8 Жусупов М.А., Шестаков В.П. Выход гамма квантов высокой энергии в реакции радиационного захвата альфа частиц ядром ${}^7\text{Li}$ //Вестник КазНУ. Сер. физ. – 2002. – Т. 12, № 1. – С.12-18.
- 9 Буркова Н.А., Жаксыбекова К.А., Жусупов М.А. Однонуклонная спектроскопия в лёгких ядрах //ЭЧАЯ. – 2009. Т. 40, Вып. 2. – С.320-395.
- 10 Жусупов М. А. и др. Взаимодействие α -частиц с ядрами ${}^6\text{Li}$ и ${}^7\text{Li}$ при низких энергиях //Изв. РАН. Сер. физ. – 2010. – Т. 74, № 6. – С. 915.
- 11 Ajzenberg-Selove F. Energy Levels of Light Nuclei A=10 // Nucl. Phys. A. – 1988. – V. 490. – P.1-225.

References

- 1 A.N. Boyarkina, Structura yader 1p-obolochki, (Moscow, Izd-vo MGU, 1973), 62 s. (in Russ)
- 2 M.A. Zhusupov, K.A. Zhaksybekova, and R.S. Kabatayeva, Cluster structure of ${}^{10}\text{B}$ nucleus levels, Book of abstracts, LXIX International conference “Nucleus-2019” on nuclear spectroscopy and nuclear structure. 1-5 July, 2019, p.300.
- 3 A.A. Ogloblin, EChAYa, 3 (4), 936 (1972). (in Russ)
- 4 M.A. Zhusupov and R.S. Kabatayeva, Bull. RAS: Phys., 76 (4), 429 (2012). (in Russ)
- 5 M.A. Zhusupov, K.A. Zhaksybekova, R.S. Kabatayeva, and A.S. Kopenbayeva, Recent Progress in Few-Body Physics, 259-262 (2020).
- 6 F.E. Cecil et al, Rev. Sci. Instrum., 57 (8), 1777 (1988).
- 7 V.T. Voronchev and V.I. Kukulin, Phys. At. Nucl., 63 (12), 2051 (2000). (in Russ)
- 8 M.A. Zhusupov and V.P. Shestakov, Rec. Contr. Phys., 12 (1), 12-18 (2002). (in Russ)
- 9 N.A. Burkova, K.A. Zhaksybekova, and M.A. Zhusupov, Phys. Part. Nucl., 40, 162 (2009.). (in Russ)
- 10 M.A. Zhusupov and et al., Bull. RAS: Phys., 74 (6), 891 (2010). (in Russ)
- 11 F. Ajzenberg-Selove, Nucl. Phys. A, 490, 1-225 (1988).

V. Folomeev^{1,2*}, B. Kleihaus³, J. Kunz³¹Academician J. Jeenbaev Institute of Physics of the NAS of the Kyrgyz Republic, Kyrgyzstan, Bishkek,²International Laboratory for Theoretical Cosmology, Tomsk State University of Control Systems and Radioelectronics (TUSUR), Russia, Tomsk³Institut für Physik, Universität Oldenburg, Germany, Oldenburg,

*e-mail: vfolomeev@mail.ru

**MIXED STAR-PLUS-WORMHOLE SYSTEMS WITH
A COMPLEX SCALAR FIELD**

We study compact mixed configurations with a nontrivial wormholelike spacetime topology supported by a complex ghost scalar field with a quartic self-interaction and a polytropic fluid. The latter is modeled by a relativistic barotropic equation of state that can approximately describe more or less realistic matter. For such systems, we find regular asymptotically flat equilibrium solutions describing localized configurations in which the fluid is concentrated in a finite-size region. The solutions obtained describe double-throat wormholes which are located outside the fluid (one can say that the fluid is hidden inside the region between the throats). Also, we consider the dependence of the total mass of the system on the central density of the fluid and demonstrate the existence of critical values of the central density at which the mass diverges. In this case all regular solutions possessing finite masses lie in the region between these critical values, and this region also contains a discontinuity in magnitudes of the central density where only physically unacceptable oscillating solutions do exist. It is shown that for some values of the central density of the fluid there can exist solutions describing systems whose fluid density and pressure maxima lie not at the center. This results in the fact that such systems possess two equators (local maxima of the metric function) resided symmetrically with respect to the center.

Key words: wormholes, nontrivial topology, complex scalar fields, polytropic fluid.

В. Фоломеев^{1,2*}, Б. Клейхаус³, Ж. Кунц³¹ Кыргыз Республикасы ҰҒА академигі Ж. Жээнбаев атындағы физика институты, Кыргызстан, Бишкек қ.,²Теориялық космологияның халықаралық зертханасы, Томск мемлекеттік басқару жүйелері және радиоэлектроника университеті (TUSUR), Ресей, Томск қ.³Физика институты, Ольденбург университеті, Германия, Ольденбург қ.

*e-mail: vfolomeev@mail.ru

**Жұлдыз және көртышқан іні бар
кешенді скалярлы өрісті аралас жүйелер**

Төрттік потенциалдық энергия және политропиялық сұйықтықпен кешенді скалярлы өріспен құрылған, бейтараптық көртышқан іні тәрізді типтегі кеңістік-уақыттық топологиямен ықшам аралас конфигурацияларды зерттейміз. Бұл конфигурация релятивистік баротропиялық теңдеумен моделденеді, ол нақтыланған затты сипаттай алады. Мұндай жүйелер үшін біз тұрақты асимптотикалық жазық тепе-теңдік шешімдерін табамыз және олар ішінара сұйықтыққа толы екі өңеші бар көртышқан індерді сипаттайтынын көрсетеміз. Алынған шешімдер сұйықтықтың сыртында орналасқан екі өңеші бар көртышқан інін сипаттайды (сұйықтық өңеш арасындағы аймақта жасырылған деп айта аламыз). Сонымен қатар жүйенің жалпы массасының сұйықтықтың орталық тығыздығына тәуелділігін қарастырамыз және масса таралатын орталық тығыздықтың критикалық мәндерінің бар екендігін көрсетеміз. Бұл жағдайда соңғы массалары бар барлық тұрақты шешімдер аймақта критикалық мәндер арасында орналасады және бұл аймақта тек физикалық жол берілмейтін тербелмелі шешімдер болатын орталық тығыздықтың мәндерінде тұрақсыздық бар. Сұйықтың орталық тығыздығының кейбір мәндері үшін сұйықтықтың тығыздығы мен оның қысымы максимумы конфигурацияның ортасында болмайтын жүйелерді сипаттайтын шешімдер болуы мүмкін екендігі көрсетілген. Бұл мұндай жүйелерде орталықта симметриялы орналасқан екі экватордың (метрикалық функцияның жергілікті максимумы) болуына әкеледі.

Түйін сөздер: көртышқан іні, тривиалды емес топология, күрделі скалярлы өрістер, политропты сұйықтық.

В. Фоломеев^{1,2*}, Б. Клейхаус³, Ж. Кунц³¹Институт физики им. академика Ж. Жеэнбаева НАН Кыргызской Республики, Кыргызстан, г. Бишкек,²Международная лаборатория теоретической космологии, Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники (ТУСУР), Россия, г. Томск³Институт физики, Олденбургский университет, Германия, г. Олденбург,
*e-mail: vfolomeev@mail.ru

Смешанные системы звезда плюс кротовая нора с комплексным скалярным полем

Мы исследуем компактные смешанные конфигурации с нетривиальной топологией пространства-времени типа кротовой норы, образованные комплексным скалярным полем с четверичной потенциальной энергией и политропной жидкостью. Последняя моделируется релятивистским баротропным уравнением состояния, которое может приближенно описывать более или менее реалистичное вещество. Для таких систем мы находим регулярные асимптотически плоские равновесные решения, описывающие локализованные конфигурации, в которых жидкость сконцентрирована в области с конечными размерами. Полученные решения описывают кротовые норы с двумя горловинами, которые расположены вне жидкости (можно сказать, что жидкость скрыта в области между горловинами). Также мы рассматриваем зависимость полной массы системы от центральной плотности жидкости и демонстрируем существование критических значений центральной плотности, при которых масса расходится. При этом все регулярные решения с конечными массами лежат в области между критическими значениями, и эта область также содержит разрыв в значениях центральной плотности, в котором имеются только физически неприемлемые осциллирующие решения. Показано, что для некоторых значений центральной плотности жидкости могут существовать решения, описывающие системы, в которых максимумы плотности жидкости и ее давления лежат не в центре конфигурации. Это приводит к тому, что такие системы обладают двумя экваторами (локальными максимумами метрической функции), расположенными симметрично относительно центра.

Ключевые слова: кротовые норы, нетривиальная топология, комплексные скалярные поля, политропная жидкость.

Introduction

At the present time various scalar fields play an important role in constructing models of the early and present Universe. In particular, they may provide both the inflationary stage in the very early Universe and its current accelerated expansion [1]. Their role on small spatial scales comparable to sizes of galaxies and their clusters, as well as on scales of stars, can also be significant. Namely, one can imagine a configuration consisting of a scalar field confined by its own gravitational field – a boson star [2, 3]. Due to the quantum Heisenberg uncertainty principle, there is a pressure inside such a star preventing it from gravitational collapse. In this sense such a scalar star is a sort of quantum-classical object whose existence is ensured simultaneously by quantum and classical properties of the scalar field. The studies performed in the literature indicate that masses of such objects can vary from atomic ones (“gravitational atom”) to masses of the order of the Chandrasekhar mass, and even much larger. It is not impossible that there can be many such objects in the Universe. Then, if their electromagnetic radiation is

weak, they can serve as candidates for the role of the missing dark matter.

In constructing models of boson stars, two types of scalar fields are used – real and complex ones [2, 3]. In doing so, usually a canonical field is employed with a fixed sign in front of the kinetic term of the scalar field Lagrangian density. If one takes the other sign, this corresponds to so-called ghost scalar fields. The possible existence of such fields in nature is indirectly supported by the observed accelerated expansion of the present Universe (see, e.g., Ref. [4]). As the canonical scalar fields, ghost fields enable one to get localized static nonsingular solutions both with a trivial spacetime topology [5] and with a nontrivial one – the so-called wormholes [6-10]. If ordinary matter or radiation can fill such wormholes, they are called traversable wormholes (for a general overview on the subject, see the books [11, 12]). As matter threading the wormhole, one can use, for example, a relativistic fluid of the type containing in neutron stars. Then the mixed neutron-star-plus-wormhole configurations will possess properties of wormholes and of ordinary stars [13-19].

The goal of the present paper is to study a wormhole supported by a complex ghost scalar field and filled with ordinary matter. To do this, we will construct localized regular solutions with a nontrivial wormholelike topology. In two limiting cases, such a system becomes the system consisting of a wormhole only (without ordinary matter) [20] or the mixed system supported by a massless real scalar field [16]. Our purpose will be to find out

what are the differences between the configurations considered here and the systems of Refs. [16, 20].

General equations

We consider a model of a mixed gravitating configuration consisting of a complex ghost scalar field and polytropic fluid. The corresponding action for such a system can be taken in the form

$$S = \int d^4x \sqrt{-g} \left\{ -\frac{c^3}{16\pi G} R + \frac{1}{2} [-g^{\mu\nu} \partial_\mu \Phi^* \partial_\nu \Phi - V(|\Phi|^2)] \right\} + S_{\text{fl}}, \quad (1)$$

where Φ is a complex scalar field with the potential $V(|\Phi|^2)$ and S_{fl} denotes the action of the fluid. Hereafter the Greek indices run over $\mu, \nu, \dots = 0, 1, 2, 3$.

By varying (1) with respect to the metric, one can obtain the gravitational equations whose right-hand side contains the energy-momentum tensor

$$\begin{aligned} T_\nu^\mu &= -\frac{1}{2} g^{\mu\sigma} (\partial_\sigma \Phi^* \partial_\nu \Phi + \partial_\sigma \Phi \partial_\nu \Phi^*) + \\ &+ \frac{1}{2} \delta_\nu^\mu (g^{\lambda\sigma} \partial_\lambda \Phi^* \partial_\sigma \Phi + V) + \\ &+ (\varepsilon + p) u^\mu u_\nu - \delta_\nu^\mu p, \end{aligned}$$

where ε is the energy density of the fluid and p is its pressure. In turn, varying (1) with respect to the scalar field, one obtains the equation for Φ ,

$$\frac{1}{\sqrt{-g}} \frac{\partial}{\partial x^\mu} \left[\sqrt{-g} g^{\mu\nu} \frac{\partial \Phi}{\partial x^\nu} \right] = \frac{dV}{d|\Phi|^2} \Phi.$$

$$-\left[2 \frac{R''}{R} + \left(\frac{R'}{R} \right)^2 \right] + \frac{1}{R^2} = \frac{8\pi G}{c^4} T_0^0 = \frac{8\pi G}{c^4} \left\{ \varepsilon + \frac{1}{2} [-(\phi'^2 + \omega^2 e^{-\nu} \phi^2) + V] \right\}, \quad (2)$$

$$-\frac{R'}{R} \left(\frac{R'}{R} + \nu' \right) + \frac{1}{R^2} = \frac{8\pi G}{c^4} T_1^1 = \frac{8\pi G}{c^4} \left[-p + \frac{1}{2} (\phi'^2 + \omega^2 e^{-\nu} \phi^2 + V) \right], \quad (3)$$

$$\frac{R''}{R} + \frac{1}{2} \frac{R'}{R} \nu' + \frac{1}{2} \nu'' + \frac{1}{4} \nu'^2 = -\frac{8\pi G}{c^4} T_2^2 = -\frac{8\pi G}{c^4} \left\{ -p + \frac{1}{2} [-(\phi'^2 - \omega^2 e^{-\nu} \phi^2) + V] \right\}, \quad (4)$$

$$\phi'' + \left(\frac{1}{2} \nu' + 2 \frac{R'}{R} \right) \phi' + \left(\omega^2 e^{-\nu} + \frac{dV}{d|\Phi|^2} \right) \phi = 0, \quad (5)$$

where the prime denotes differentiation with respect to r . Depending on the specific form of the potential

Our goal here is to study equilibrium wormhole-plus-fluid solutions. To this end, it is convenient to take the spherically symmetric metric in polar Gaussian coordinates

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

where ν and R are functions of the radial coordinate r only.

We will study localized solutions with a wormholelike topology, which is ensured by the presence of the complex ghost scalar field in the action (1). Then, in order to have no time dependence in the gravitational equations, we use for the scalar field the harmonic ansatz

$$\Phi(x^0, r) = \phi(r) e^{-i\omega x^0},$$

which ensures that the spacetime of the configuration under consideration remains static. As a result, we have the following set of Einstein-scalar equations:

V and the boundary conditions, it is possible to obtain localized equilibrium solutions by solving

these equations numerically. Notice here that in the absence of the fluid we return to the system of Ref. [20]. In turn, when $\omega = V = 0$, we have the system of Ref. [16].

In order to obtain regular asymptotically flat solutions with a nontrivial topology, we take the potential

$$V = -\frac{m^2 c^2}{\hbar^2} |\Phi|^2 + \frac{1}{2} \frac{\bar{\lambda}}{\hbar c} |\Phi|^4, \quad (6)$$

where m and $\bar{\lambda}$ are free parameters of the scalar field.

Next, the above equations have to be supplemented by an equation of state for the fluid. We consider here the simplest case of a barotropic equation of state where the pressure is a function of the mass density ρ . Namely, we take the following polytropic equation of state that can approximately describe more or less realistic matter:

$$p = K\rho^{1+1/n}, \varepsilon = \rho c^2 + np, \quad (7)$$

where the constant $K = kc^2(n_b^{(ch)} m_b)^{1-\gamma}$, the polytropic index $n = 1/(\gamma - 1)$, and $\rho = n_b m_b$ denotes the rest-mass density of the fluid. Here n_b is the baryon number density, $n_b^{(ch)}$ is a characteristic value of n_b , m_b is the baryon mass, and k and γ are parameters whose values depend on the properties of the matter. For the sake of simplicity, we take here only one set of parameters $m_b = 1.66 \times 10^{-24}$ g, $n_b^{(ch)} = 0.1$ fm $^{-3}$, $k = 0.1$, and $\gamma = 2$ [21], and employ them in the numerical calculations of Sec. 3.

Then, introducing the new variable θ ,

$$\rho = \rho_c \theta^n,$$

where ρ_c is the central density of the fluid, we can rewrite the pressure and the energy density from Eq. (7) as

$$p = K\rho_c^{1+1/n} \theta^{n+1}, \varepsilon = (\rho_c c^2 + nK\rho_c^{1+1/n} \theta) \theta^n.$$

$$-\left[2\frac{X''}{X} + \left(\frac{X'}{X}\right)^2\right] + \frac{1}{X^2} = B(1 + \sigma n\theta)\theta^n - \varphi'^2 - \Omega^2 e^{-\nu} \varphi^2 - \varphi^2 + \frac{\Lambda}{2} \varphi^4, \quad (10)$$

$$-\frac{X'}{X} \left(\frac{X'}{X} + \nu'\right) + \frac{1}{X^2} = -B\sigma\theta^{n+1} + \varphi'^2 + \Omega^2 e^{-\nu} \varphi^2 - \varphi^2 + \frac{\Lambda}{2} \varphi^4, \quad (11)$$

$$\frac{X''}{X} + \frac{1}{2} \frac{X'}{X} \nu' + \frac{1}{2} \nu'' + \frac{1}{4} \nu'^2 = B\sigma\theta^{n+1} + \varphi'^2 - \Omega^2 e^{-\nu} \varphi^2 + \varphi^2 - \frac{\Lambda}{2} \varphi^4, \quad (12)$$

Making use of these expressions and of the equation that follows from the $\mu = r$ component of the law of conservation of energy and momentum, $T_{\mu;\nu}^\nu = 0$,

$$\frac{dp}{dr} = -\frac{1}{2}(\varepsilon + p) \frac{d\nu}{dr},$$

we have for the internal region with $\theta \neq 0$,

$$2\sigma(n+1) \frac{d\theta}{dr} = -[1 + \sigma(n+1)\theta] \frac{d\nu}{dr}, \quad (8)$$

where $\sigma = K\rho_c^{1/n}/c^2 = p_c/(\rho_c c^2)$ is a dimensionless relativity parameter, related to the central pressure p_c of the fluid. Integrating this equation, we get the metric function e^ν in terms of θ ,

$$e^\nu = e^{\nu_c} \left[\frac{1 + \sigma(n+1)}{1 + \sigma(n+1)\theta} \right]^2,$$

and e^{ν_c} is the value of e^ν at the center where $\theta = 1$. The integration constant ν_c is fixed by the requirement of the asymptotic flatness of the spacetime, i.e., $e^\nu \rightarrow 1$ at infinity.

Numerical solutions

Let us now turn to the numerical calculations. For this purpose, it is convenient to rewrite the above equations in terms of the dimensionless variables

$$\begin{aligned} x &= \frac{r}{\lambda_c}, X = \frac{R}{\lambda_c}, \Omega = \lambda_c \omega, \Lambda = \\ &= \frac{\hbar c}{4\pi G m^2} \bar{\lambda}, \varphi = \frac{\sqrt{4\pi G}}{c^2} \phi, \end{aligned} \quad (9)$$

where $\lambda_c = \hbar/mc$ is the constant having the dimensions of length (since we consider a classical theory, λ_c need not be associated with the Compton length). Then, using the potential (6), one can rewrite Eqs. (2)-(5) in the form

$$\varphi'' + \left(\frac{1}{2}v' + 2\frac{X'}{X}\right)\varphi' + (\Omega^2 e^{-v} - 1 + \Lambda\varphi^2)\varphi = 0, \quad (13)$$

where $B = 8\pi G\lambda_c^2\rho_c/c^2$. Since, due to the Bianchi identities, not all of these equations are independent, one may use any three of them in calculations. Here, we will solve Eqs. (8), (10), (12), and (13), treating the first-order equation (11) as a constraint equation to check the accuracy of the computations.

When solving the above equations, we use the symmetric boundary conditions imposed at the center $x = 0$,

$$X(0) = X_c, v(0) = v_c, \varphi(0) = \varphi_c, \theta(0) = 1 \quad (14)$$

(all first-order derivatives are supposed to be zero at the center). The constraint equation (11) then yields

$$X_c = \frac{1}{\sqrt{\varphi_c^2(\Omega^2 e^{-v_c} - 1 + (\Lambda/2)\varphi_c^2) - B\sigma}}. \quad (15)$$

Using this expression and expanding the function X in the vicinity of the center as $X \approx X_c + 1/2 X_2 x^2$, one can find from Eq. (10) the value of the second derivative of X at the center

$$X_2 = \frac{X_c}{2} \{2\Omega^2 e^{-v_c} \varphi_c^2 - B[1 + \sigma(n+1)]\}. \quad (16)$$

Thus we have three parameters – φ_c , v_c , and Ω , one of which can be chosen arbitrarily. For instance, as in the case of boson stars [22], as such a parameter, one can take φ_c . Then, the other two parameters should be chosen in such a way as to ensure asymptotic flatness of the spacetime, when φ , φ' , and $v \rightarrow 0$ and $X \rightarrow x$. In this sense, we will deal with an eigenvalue problem for the parameters v_c and Ω .

It is also useful to write out the asymptotic behavior of the solutions:

$$\begin{aligned} e^v &\rightarrow 1 - \frac{2C_2}{x}, X \rightarrow x, X' \rightarrow 1 - \frac{C_2}{x}, \\ \varphi &\rightarrow C_1 \exp\left(-\sqrt{1 - \Omega^2} x\right) x^\beta \text{ for } 0 \leq \Omega < \\ &< 1, \varphi \rightarrow C_3 \frac{\exp(-\sqrt{8|C_2|x})}{x^{\frac{3}{4}}} \text{ for } \Omega = 1, \end{aligned} \quad (17)$$

where C_1, C_2 , and C_3 are integration constants and $\beta = -1 + C_2\Omega^2/\sqrt{1 - \Omega^2}$. Note that the integration

constant C_2 plays the role of the Arnowitt-Deser-Misner (ADM) mass of the wormhole-plus-fluid configurations under consideration.

We solve the set of equations (8) and (10)-(13) numerically, using the boundary conditions (14) and (15) and varying the value of the boson frequency Ω in the interval $0 \leq \Omega \leq 1$ [the lower limit $\Omega = 0$ corresponds to the case of real scalar fields and the upper limit is the necessary condition to ensure a nonoscillating asymptotic behavior of the scalar field; see Eq. (17)]. In doing so, the systems under consideration may be subdivided into two regions: (i) the internal one, where both the fluid and the scalar field are present; (ii) the external one, where only the scalar field is present. Correspondingly, the solutions in the external region can be obtained from Eqs. (10)-(13), where the function θ is set to be zero. The internal solutions should be matched with the external ones at the edge of the fluid, $x = x_b$. This is done by equating the corresponding values of the functions φ , X , v and their derivatives. The boundary of the fluid x_b is defined by the condition $p(x_b) = 0$. In turn, the integration constant v_c can be determined from the asymptotic solutions, proceeding from the requirement that the external solutions must be asymptotically flat.

In the left panels of figure 1, we show a set of typical solutions for the scalar field function φ , the fluid function θ , and the metric function v . The value of the boson frequency $\Omega = 1$ represents the limiting value of the physically acceptable interval. Note that for the chosen value $\varphi_c = 0.5$ another limiting case $\Omega = 0$ is undistinguishable since regular solutions do exist not for all B but are restricted by some critical values of $B = B_{\text{crit}}$ (see below). An interesting feature of the system is the possibility of the presence of the maximum of the fluid density shifted with respect to the center of the configuration; see figure 1(a).

In the right panels of figure 1, we exhibit the solutions for the metric function X . Its behavior strongly depends on the sign of the expansion coefficient Σ_2 from (16). Namely, for the given $\varphi_c = 0.5$, the configurations always possess a double throat when the minimum value $X_{\text{th}} = \min\{X(x)\}$ is on either side of the center of the configuration. In this case there are two possibilities: (i) if $X_2 < 0$, there is one equator (a

local maximum of X); see figure 1(d); (ii) if $X_2 > 0$, there may be already two equators located symmetrically with respect to the center; see figure 1(b). The existence of the double-equator systems is

a distinctive feature of the mixed system with the complex scalar field; in the case of the use of a real scalar field, there are only systems possessing one equator [16].

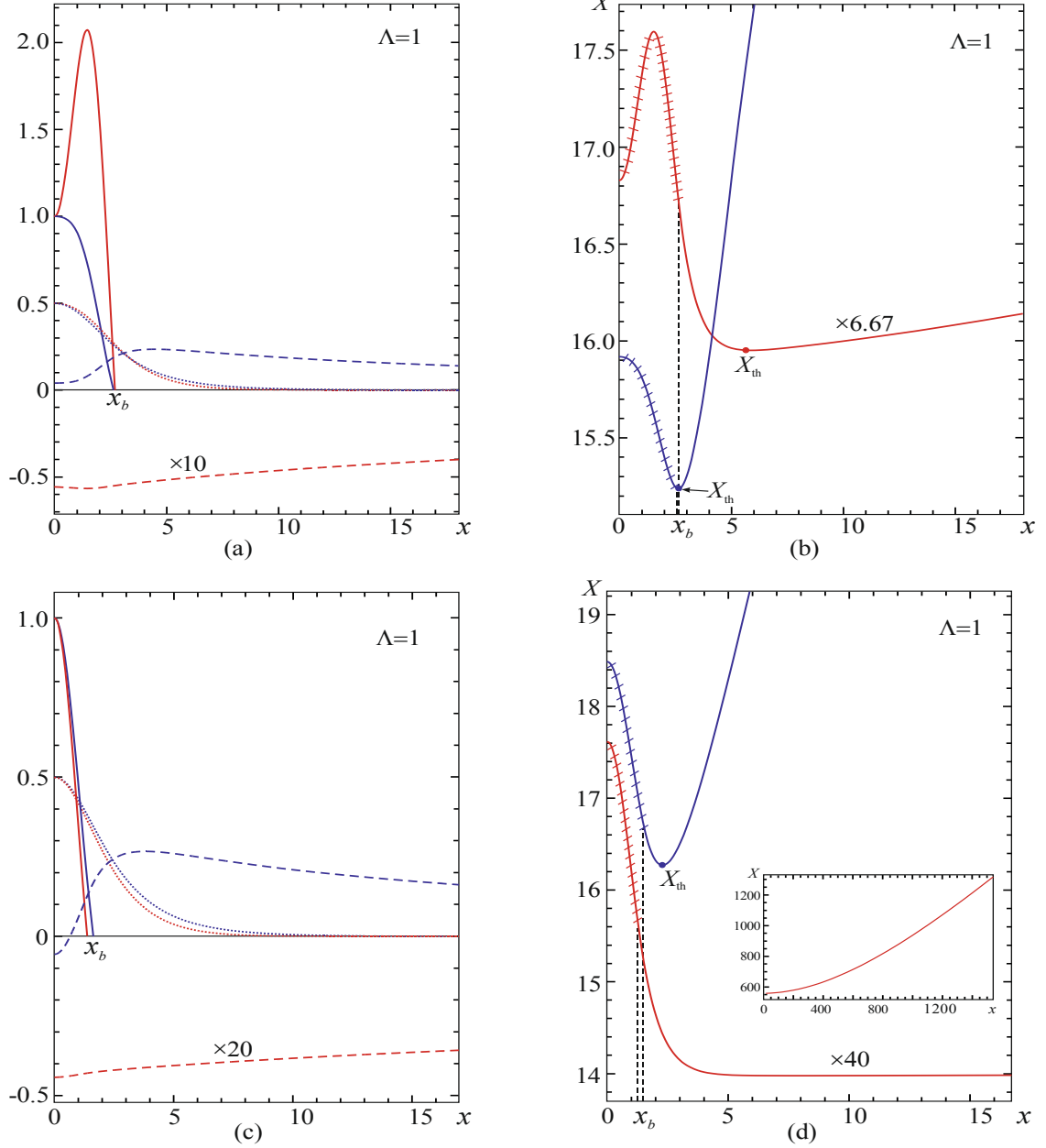


Figure 1 – Left panels: the scalar field function φ (dotted lines), the fluid function θ (solid lines), and the metric function ν (dashed lines). Right panels: the graphs of the metric function X , where the positions of the throats $X_{th} = \min\{X(x)\}$ are shown by the bold dots. The shaded segments of the curves represent the regions where the fluid is present. The inset shows the asymptotic behavior when $X \rightarrow x$. For all plots, the blue curves correspond to the configurations with the limiting value $\Omega = 1$, the red curves are for the configurations with $\Omega \approx 0.058$ [B_{crit1} : (a) and (b)] and with $\Omega \approx 0.013$ [B_{crit2} : (c) and (d)]. The central value of the scalar field is taken to be $\varphi_c = 0.5$. In view of the symmetry $x \rightarrow -x$, only the solutions for positive x are shown. The numbers near the curves are the values of the corresponding scale factor introduced for convenience of representation.

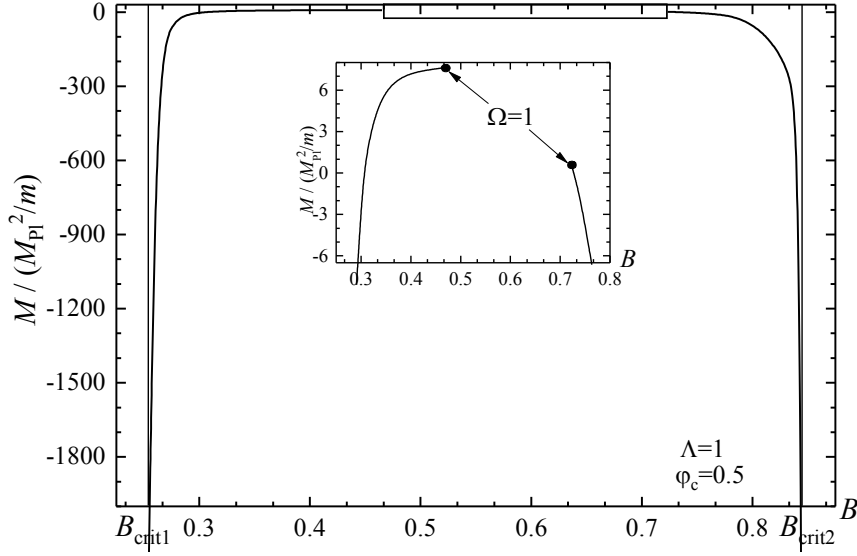


Figure 2 – The total mass of the configuration M as a function of the parameter B .

The thin vertical lines correspond to $B = B_{\text{crit}}$ for which the mass of the configurations diverges (the corresponding solutions describing systems near these points are shown by red lines in figure 1 with $\Omega \approx 0.058$ for $B = B_{\text{crit1}}$ and $\Omega \approx 0.013$ for $B = B_{\text{crit2}}$). In the shaded region $\Omega > 1$, and the solutions for the scalar field are oscillating. The inset shows the region where the masses are close to zero.

For all cases considered here, the throats are located beyond the fluid, i.e., the fluid is completely hidden in the region between the throats. For other values of φ_c one may expect both the existence of single-throat configurations and of systems with two throats filled with a fluid, as it takes place for the system of Ref. [16] supported by a real scalar field. But this issue requires special studies.

Let us now consider the ADM mass of the above systems. For a spherically symmetric configuration, the Misner-Sharp [23] mass $M(r)$ inside the volume

enclosed by a sphere with circumferential radius R_c , which corresponds to the center of the system, and another sphere having the radius $R > R_c$, can be defined as follows:

$$M(r) = \frac{c^2}{2G} R_c + \frac{4\pi}{c^2} \int_{R_c}^r T_0^0 R^2 dR.$$

Taking the boundary to (spacelike) infinity, the Misner-Sharp mass gives the ADM mass. In the dimensionless variables (9), we then have

$$M(x) \equiv \frac{M(x)}{\frac{M_{\text{Pl}}^2}{m}} = \frac{1}{2} \left[X_c + \int_0^x \left[B(1 + \sigma n \theta) \theta^n - \varphi'^2 - \Omega^2 e^{-\nu} \varphi^2 - \varphi^2 + \frac{\Lambda}{2} \varphi^4 \right] X^2 \frac{dX}{dx'} dx' \right],$$

where M_{Pl} is the Planck mass.

The results of the calculations of the mass are presented in figure 2. It is interesting to compare the results obtained with those found for wormholes supported by a real massless scalar and threaded by the same fluid [16]. Depending on the value of the parameter B , masses of those configurations can vary from 0 (for $B = 0$) up to some finite positive magnitude for the critical value of $B = B_{\text{crit}}$. The existence of the latter follows from Eq. (15) and corresponds to the

equality of the denominator to zero; as a result, $X_c \rightarrow \infty$. For the complex scalar fields considered in the present paper, we have not one but two critical values B_{crit1} and B_{crit2} , near which the total mass of the configurations increases (modulus) rapidly and eventually diverges (see figure 2). In this case physically interesting solutions exist only for $B > B_{\text{crit1}}$ and $B < B_{\text{crit2}}$, up/down to the values of B for which the boson frequency $\Omega \rightarrow 1$ (see the inset of figure 2). Correspondingly, there is a discontinuity in

possible values of B (the shaded region in figure 2 where $\Omega > 1$), where only asymptotically oscillating solutions for the scalar field do exist [cf. Eq. (17)].

Conclusion

We have considered mixed systems consisting of a complex ghost scalar field with a quartic potential and ordinary polytropic fluid. This study extends the previous researches of Refs. [16, 20] where the systems with a real massless scalar field plus a polytropic fluid [16] and the configurations supported by a complex ghost scalar field without ordinary matter [20] have been considered. We have shown that there exist static regular asymptotically flat solutions describing localized configurations in which the fluid is concentrated in a finite-size region. We have demonstrated that for the chosen central value of the scalar field (i) there exist only double-throat configurations; and (ii) the wormhole throats are located outside the fluid (or one can say that the fluid is hidden inside the region between the throats). Unlike the configurations of Ref. [16], the systems considered here possess the following new properties:

(1) Instead of one critical value B_{crit} , there are two different critical values $B_{\text{crit}1}$ and $B_{\text{crit}2}$ for

which the total mass diverges. All regular solutions possessing finite masses lie in the region between these critical B 's, and this region also contains a discontinuity in B (shown by the shaded region in figure 2) where the boson frequency $\Omega > 1$; this corresponds to the presence of oscillations of the scalar field, that is physically unacceptable.

(2) For some values of B , there can exist solutions describing systems whose fluid density and pressure maxima lie not at the center [see figure 1(a)]. This results in the fact that such systems possess two equators resided symmetrically with respect to the center; see figure 1(b).

The solutions obtained cover only a restricted set of the model parameters. In further investigations, we plan to extend these calculations. Moreover, it will be interesting to address their rotating generalizations [24].

Acknowledgements

We are grateful to the Research Group Linkage Programme of the Alexander von Humboldt Foundation for the support of this research. BK and JK gratefully acknowledge support by the DFG Research Training Group 1620 *Models of Gravity* and the COST Action CA16104.







References

- 1 Ade P.A.R. *et al.* (Planck Collaboration) Planck 2015 results. XIII. Cosmological parameters // *Astron. Astrophys.* – 2016. – Vol.594:A13.
- 2 Schunck F.E. and Mielke E.W. General relativistic boson stars // *Classical Quantum Gravity.* – 2003. – Vol. 20. – P.R301.
- 3 Liebling S.L. and Palenzuela C. Dynamical Boson Stars // *Living Rev. Relativity.* – 2012. – Vol. 15. – P. 6.
- 4 Sullivan M. *et al.* SNLS3: Constraints on Dark Energy Combining the Supernova Legacy Survey Three Year Data with Other Probes // *Astrophys. J.* – 2011. – Vol.737. – P.102.
- 5 Dzhunushaliev V., Folomeev V., Myrzakulov R., and Singleton D. Non-singular solutions to Einstein-Klein-Gordon equations with a phantom scalar field // *J. High Energy Phys.* – 2008. – Vol.7:094. – 14 p.
- 6 Bronnikov K.A. Scalar-tensor theory and scalar charge // *Acta Phys. Polon.* – 1973. – Vol.B4. –P.251.
- 7 Ellis H.G. Ether flow through a drainhole – a particle model in general relativity // *Math. Phys.* – 1973. – Vol.14. – P.104.
- 8 Ellis H.G. The Evolving, Flowless Drain Hole: A Nongravitating Particle Model In General Relativity Theory // *General Relativ. Gravit.* – 1979. – Vol.10. – P. 105.
- 9 Kodama T. General Relativistic Nonlinear Field: A Kink Solution in a Generalized Geometry // *Phys. Rev.* – 1978. – Vol.D18. – P.3529.
- 10 Kodama T., de Oliveira L.C.S., and Santos F.C. Properties of a general-relativistic kink solution // *Phys. Rev.* – 1979. – Vol.D19. – P. 3576.
- 11 Visser M. *Lorentzian Wormholes: From Einstein to Hawking.* – New York: Woodbury, 1996. – 412 p.
- 12 Lobo F.S.N. *Wormholes, Warp Drives and Energy Conditions.* – Springer International Publishing Company, 2017. – 436 p.
- 13 Dzhunushaliev V., Folomeev V., Kleihaus B., and Kunz J. A Star Harbouring a Wormhole at its Core // *J. Cosmol. Astropart. Phys.* – 2011. – Vol.04:031. – 22 p.
- 14 Dzhunushaliev V., Folomeev V., Kleihaus B., and Kunz J. Mixed neutron star-plus-wormhole systems: Equilibrium configurations // *Phys. Rev.* – 2012. – Vol.D85:124028. – 14 p.
- 15 Dzhunushaliev V., Folomeev V., Kleihaus B., and Kunz J. Mixed neutron-star-plus-wormhole systems: Linear stability analysis // *Phys. Rev.* – 2013. – Vol. D87:104036. – 12 p.
- 16 Dzhunushaliev V., Folomeev V., Kleihaus B., and Kunz J. Hiding a neutron star inside a wormhole // *Phys. Rev.* – 2014. – Vol.D89:084018. – 14 p.
- 17 Aringazin A., Dzhunushaliev V., Folomeev V., Kleihaus B., and Kunz J. Magnetic fields in mixed neutron-star-plus-wormhole systems // *JCAP.* – 2015. – Vol.1504:005. – 23 p.

- 18 Dzhunushaliev V., Folomeev V., and Urazalina A. Star-plus-wormhole systems with two interacting scalar fields // *Int. J. Mod. Phys.* – 2015. – Vol.D24. – P.14.
- 19 Dzhunushaliev V., Folomeev V., Kleihaus B., and Kunz J. Can mixed star-plus-wormhole systems mimic black holes? // *JCAP.* – 2016. – Vol.1608:030. – 27 p.
- 20 Dzhunushaliev V., Folomeev V., Kleihaus B., and Kunz J. Wormhole solutions with a complex ghost scalar field and their instability // *Phys. Rev.* – 2018. – Vol. D97:024002. – 10 p.
- 21 Salgado M., Bonazzola S., Gourgoulhon E., and Haensel P. High precision rotating neutron star models 1: Analysis of neutron star properties // *Astron. Astrophys.* – 1994. – Vol. 291. – P. 155.
- 22 Colpi M., Shapiro S. L., and Wasserman I. Boson Stars: Gravitational Equilibria of Selfinteracting Scalar Fields // *Phys. Rev. Lett.* – 1986. – Vol.57. – P.2485.
- 23 Misner C. W. and Sharp D. H. Relativistic equations for adiabatic, spherically symmetric gravitational collapse // *Phys. Rev.* – 1964. – Vol.136. – P. B571.
- 24 Chew X. Y., Dzhunushaliev V., Folomeev V., Kleihaus B., and Kunz J. Rotating wormhole solutions with a complex phantom scalar field // *Phys. Rev.* – 2019. – Vol. D100:044019. – 12 p.

References

- 1 P.A.R. Ade *et al.* (Planck Collaboration), *Astron. Astrophys.*, 594:A13 (2016).
- 2 Schunck F.E. and Mielke E. W. General relativistic boson stars // *Classical Quantum Gravity.* – 2003. – Vol. 20. – P.R301.
- 3 S.L. Liebling and C. Palenzuela, *Living Rev. Relativity*, 15, 6 (2012).
- 4 M. Sullivan *et al.*, *Astrophys. J.*, 737, 102 (2011).
- 5 V. Dzhunushaliev, V. Folomeev, R. Myrzakulov, and D. Singleton, *J. High Energy Phys.*, 7:094 (2008).
- 6 K.A. Bronnikov, *Acta Phys. Polon.B4*, 251 (1973).
- 7 H.G. Ellis, *Math. Phys.*, 14, 104 (1973).
- 8 H.G. Ellis, *General Relativ. Gravit.*, 10, 105 (1979).
- 9 T. Kodama, *Phys. Rev. D18*, 3529 (1978).
- 10 T. Kodama, L.C.S. de Oliveira, and F.C. Santos, *Phys. Rev. D19*, 3576 (1979).
- 11 M. Visser, *Lorentzian Wormholes: From Einstein to Hawking*, (Woodbury, New York, 1996), 412 p.
- 12 F.S.N. Lobo *Wormholes, Warp Drives and Energy Conditions*, (Springer International Publishing Company, 2017), 436 p.
- 13 V. Dzhunushaliev, V. Folomeev, B. Kleihaus, and J. Kunz, *J. Cosmol. Astropart. Phys.*, 04:031 (2011).
- 14 V. Dzhunushaliev, V. Folomeev, B. Kleihaus, and J. Kunz, *Phys. Rev. D85*:124028 (2012).
- 15 V. Dzhunushaliev, V. Folomeev, B. Kleihaus, and J. Kunz, *Phys. Rev. D87*:104036 (2013).
- 16 V. Dzhunushaliev, V. Folomeev, B. Kleihaus, and J. Kunz, *Phys. Rev. D89*:084018. (2014).
- 17 A. Aringazin, V. Dzhunushaliev, V. Folomeev, B. Kleihaus, and J. Kunz, *JCAP*, 1504:005 (2015).
- 18 V. Dzhunushaliev, V. Folomeev, and A. Urazalina, *Int. J. Mod. Phys. D24*, 14 (2015).
- 19 V. Dzhunushaliev, V. Folomeev, B. Kleihaus, and J. Kunz, *JCAP*, 1608:030 (2016).
- 20 V. Dzhunushaliev, V. Folomeev, B. Kleihaus, and J. Kunz, *Phys. Rev. D97*:024002 (2018).
- 21 M. Salgado, S. Bonazzola, E. Gourgoulhon, and P. Haensel, *Astron. Astrophys.*, 291, 155 (1994).
- 22 M. Colpi, S.L. Shapiro, and I. Wasserman, *Phys. Rev. Lett.*, 57, 2485 (1986).
- 23 C.W. Misner and D.H. Sharp, *Phys. Rev.* 136, B571 (1964).
- 24 X.Y. Chew, V. Dzhunushaliev, V. Folomeev, B. Kleihaus, and J. Kunz, *Phys. Rev. D100*:044019 (2019).

Т. Комеш^{1,2,3} , А.Б. Манапбаева¹ , Ж. Есимбек² ,
Н.Ш. Алимгазинова¹ , М.Т. Кызгарина^{1*} , Б. Куанбек¹ ,

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

²Синьцзянская астрономическая обсерватория Академии наук Китая, Китай, г. Урумчи

³Университет академии наук Китая, Китай, г. Пекин

*e-mail: meir83physics@gmail.com

ИНТЕРПРЕТАЦИЯ РАДИОАСТРОНОМИЧЕСКИХ НАБЛЮДЕНИЙ H₂CO И H_{110α} В ОБЛАСТЯХ ЗВЕЗДООБРАЗОВАНИЯ W40 И SERPENS SOUTH МОЛЕКУЛЯРНОГО ОБЛАКА AQUILA

В работе представлены результаты радиоастрономических наблюдений спектральных линий поглощения молекулы формальдегида (H₂CO) и рекомбинационной линии H_{110α} в направлении к молекулярному облаку Aquila. Произведена интерпретация радиоастрономических наблюдений H₂CO (l₁₀-l₁₁) и H_{110α} в W40 и Serpens South молекулярного комплекса Aquila Rift, которые получены на 26 м радиотелескопе Нань-Шань Синьцзянской астрономической обсерватории Китайской академии наук. Для построения радиокарт были использованы также архивные данные, полученные при наблюдениях молекул ¹²CO(2-1) и ¹³CO(2-1) и 6 см континуума для региона Aquila Rift.

На основе полученных наблюдательных данных были рассчитаны оптическая глубина и плотность столбца для линии поглощения H₂CO и линии излучения ¹³CO (J=1-0), построены интегрированные карты интенсивности с областью ионизированного водорода H II и наложенными контурами, которые соответствуют линиям поглощения H₂CO и рекомбинационной линии H_{110α} в направлении молекулярного облака Aquila; карты интенсивности излучения ¹³CO (1-0), распределения 6 см радиоконтинуума, инфракрасного излучения, наложенные на интегрированные контуры поглощения H₂CO; зависимости линейных потоков и пиковых плотностей столбцов для H₂CO и ¹³CO. В работе показано, что регион Serpens South, выделенный контурами при поглощении формальдегида H₂CO, происходит от космического микроволнового фона. Была обнаружена корреляция между значениями параметров для линии поглощения H₂CO и линии излучения ¹³CO. Построены интегрированные карты интенсивности при различных значениях скорости канала линии поглощения H₂CO в направлении молекулярного облака Aquila. Выявлено, что скорости H₂CO и ¹³CO имеют близкие друг к другу значения.

Анализ проведенного исследования позволил сделать вывод о том, что линии поглощения молекулы формальдегида H₂CO и линии излучения ¹³CO происходят из одного и того же региона в комплексе Aquila Rift молекулярного облака Aquila.

Ключевые слова: молекулярные облака, спектр, звездообразование.

T. Komeshe^{1,2,3}, A.B. Manapbayeva¹, J. Esimbek²,
N.Sh. Alimgazinova¹, M.T. Kyzgarina^{1*}, B. Kuanbek¹

¹Al-Farabi Kazakh National University, Kazakhstan, Almaty,

²Xinjiang Astronomical Observatory, Chinese Academy of Sciences, China, Urumqi

³University of the Chinese Academy of Sciences, China, Beijing

*e-mail: meir83physics@gmail.com

Interpretation of radioastronomic observations of H₂CO and H_{110α} in W40 and Serpens South star formation regions of Aquila molecular cloud

This study presents the results of radio astronomy observations of the absorption spectral lines of a formaldehyde molecule (H₂CO) and the H_{110α} recombination line towards the Aquila molecular cloud. The paper interprets the radio astronomy observations of H₂CO(l₁₀-l₁₁) and H_{110α} in the W40 and Serpens South of the Aquila Rift molecular complex, which were obtained by the 26m Nan-Shan radio telescope of the Xinjiang Astronomical Observatory of the Chinese Academy of Sciences. In order to construct radio maps, we also used archival data obtained by observing ¹²CO(2-1) and ¹³CO(2-1) and 6cm continuum molecules for the Aquila Rift region.

Based on the obtained observational data, the optical depth and column density were calculated for the H_2CO absorption line and ^{13}CO emission line ($J=1-0$), integrated intensity maps were constructed with the ionized hydrogen region HII and imposed contours that correspond to the absorption lines of H_2CO and the recombination line $H_{110\alpha}$ in the direction of the Aquila molecular cloud; maps of radiation intensity $^{13}CO(1-0)$, distribution of 6cm of the radio continuum, infrared radiation superimposed on integrated absorption contours of H_2CO ; dependences of linear flows and peak column densities for H_2CO and ^{13}CO are obtained. It is shown that the Serpens South region, highlighted by the contours during the absorption of formaldehyde H_2CO , comes from the cosmic microwave background. A correlation was found between the parameter values for the H_2CO absorption line and the ^{13}CO emission line. Integrated intensity maps were constructed for various values of the channel velocity of the H_2CO absorption line in the direction of the Aquila molecular cloud. It was revealed that the rates of H_2CO and ^{13}CO have close values to each other.

An analysis of the study led to the conclusion that the absorption lines of the H_2CO formaldehyde molecule and the ^{13}CO emission lines originate from the same region in the Aquila Rift complex of the Aquila molecular cloud.

Key words: molecular clouds, spectrum, star formation.

Т. Көмеш^{1,2,3}, А.Б. Манапбаева¹, Ж. Есімбек²,
Н.Ш. Алимгазина¹, М.Т. Қызгарина^{1*}, Б. Қуанбек¹

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

²Шыңжаң Астрономиялық Обсерваториясы, Қытай Ғылым Академиясы, ҚХР, Үрімжі қ.

³Қытай Ғылым Академиясы Университеті, ҚХР, Пекин қ.

*e-mail: meir83physics@gmail.com

Aquila молекулалық бұлтының W40 және Serpens South жұлдызтүзілу аймақтарындағы H_2CO және $H_{110\alpha}$ радиоастрономиялық бақылауларының интерпретациясы

Бұл зерттеуде Aquila молекулалық бұлты бағытындағы формальдегид молекуласының (H_2CO) жұтылу спектрлік сызықтарын және $H_{110\alpha}$ рекомбинация сызығын радио астрономиялық бақылау нәтижелері ұсынылды. Мақалада Қытай ғылым академиясының Шыңжаң астрономиялық обсерваториясының 26-метрлік Nanshan радиотелескопында алынған Aquila Rift молекулалық кешенінің W40 және Serpens South H_2CO (I_{10-11}) және $H_{110\alpha}$ астрономиялық бақылаулары түсіндірілді. Радио карталарды салу үшін біз Aquila Rift аймағы үшін 6 см континуум және $^{12}CO(2-1)$ және $^{13}CO(2-1)$ молекулаларды бақылау арқылы алынған мұрағаттық деректерді де пайдаландық. Алынған бақылаушылық мәліметтер негізінде H_2CO жұтылу сызығы мен ^{13}CO ($J=1-0$) сәуле шығару сызығының оптикалық тереңдігі мен бағанның тығыздығы есептелінді, Aquila молекулалық бұлты бағытындағы H_2CO жұтылу сызығы мен $H_{110\alpha}$ рекомбинация сызығына сәйкес келетін контурлар салынған және H II иондалған сутегі аймағы бар интенсивтіліктің қарқындылық картасы құрылды; ^{13}CO ($1-0$) сәуле шығару қарқындылығының, 6 см радио континуумның таралуы, H_2CO жұтылудың интеграцияланған контурлары салынған инфрақызыл сәулеленулер карталары жасалынды; сызықтық ағындар мен шың бағандары тығыздығының тәуелділігі H_2CO мен ^{13}CO үшін тұрғызылды. Жұмыста H_2CO формальдегидтің жұтылуы кезінде контурлармен ерекшеленген Serpens South аймағы ғарыштық микротолқынды фоннан шығатыны көрсетілді. H_2CO жұтылу сызығы мен ^{13}CO сәуле шығару сызығының параметрлік мәндерінің арасында корреляция табылды. Интенсивтіліктің интеграцияланған карталары Aquila молекулалық бұлты бағытында H_2CO жұтылу сызығының канал жылдамдығының әртүрлі мәндері үшін құрылды. H_2CO мен ^{13}CO жылдамдықтары бір-біріне жақын мәндерге ие екендігі анықталды.

Жүргізілген зерттеуді талдау H_2CO формальдегид молекуласының жұтылу сызықтары және ^{13}CO шығарылу сызықтары Aquila молекулалық бұлтының Aquila Rift кешеніндегі бірдей аймақтардан пайда болады деген қорытындыға әкелді.

Түйін сөздер: молекулалық бұлттар, спектр, жұлдызтүзілу.

Введение

Одной из важнейших задач астрофизики является исследование областей и процессов образования звезд. Так как молекулярные облака межзвездной среды Галактики являются важнейшими структурами в областях звездообразования, то изучение их состава, внутреннего

строения, происхождения и эволюции позволит внести существенный вклад в решение данной проблемы.

Молекулярное облако – тип межзвездного облака, чья плотность и размер позволяют в нём образовываться молекулам и различным сложным соединениям. Молекулы же из-за сложной их структуры имеют очень много

спектральных линий в радиодиапазоне. В ряде работ [1-3] показано, что молекулярные облака насыщены сложными молекулами: в спектре легко отождествляются линии воды, монооксида углерода и диоксида серы, а также органических соединений – формальдегида, метанола, диметилового эфира, синильной кислоты и их изотопных аналогов. В работе [1] было показано, что молекулы позднего типа (например, NH_3) имеют более высокое содержание в активных областях звездообразования. В настоящее время практически не были изучены свойства и динамика поведения формальдегида в молекулярных облаках, поэтому представляет интерес изучение таких сложных органических соединений.

Молекула формальдегида H_2CO наблюдается при поглощении в фоновом континууме, и это дает различные ограничения для миллиметровых и субмиллиметровых спектральных линий, которые видны как перед областью ионизированного водорода H II, так и за ней. H_2CO можно рассматривать как показатель физических условий для переднего плана облака. Распределение формальдегида H_2CO в Галактике исследовано в работе [4]. Линии поглощения H_2CO на частоте 4,830 ГГц и рекомбинационные линии $\text{H}_{110\alpha}$ на частоте 4,874 ГГц для 262 Галактических радиисточника были изучены в [5]. Эти исследования подтверждают, что распределение H_2CO связано с большинством регионов ионизированного водорода H II. В работе [6] установлено, что распределение молекулы формальдегида H_2CO аналогично распределению молекул ^{12}CO и ^{13}CO . Корреляция между распределениями молекул ^{13}CO и молекул формальдегида H_2CO выше, чем между распределениями молекулами ^{12}CO и H_2CO . Это говорит о том, что данные молекулы ^{13}CO и H_2CO присутствуют в типичных областях.

Данная работа посвящена изучению молекулярного облака Aquila путем анализа радиоастрономических наблюдений спектральных линий формальдегида (H_2CO) и рекомбинационной линии $\text{H}_{110\alpha}$. Основная цель исследования – на основе анализа полученных собственных радиоспектров, построенных радиокарт и изучения физических свойств молекулы формальдегида H_2CO обнаружение областей звездообразования с последующим определением стадий их эволюции.

Молекулярное облако Aquila (Aquila Molecular Cloud – AMC) или комплекс Aquila Rift, как показывают наблюдения CO и H_1 [7,8]

расположен вдоль галактической плоскости и простирается от 20° до 40° по долготе и от -1° до 10° по широте. В западной части Aquila Rift находится несколько активных областей звездообразования: Serpens Main, Serpens South, W40 и MWC297. Нас интересует часть комплекса Aquila Rift, в котором находятся две известные области звездообразования: западный Serpens South, который представляет собой молодой встроенный кластер [9], и восточный W40, представляющий собой кластер, связанный с регионом ионизированного водорода H II [9]. Расстояние до региона W40 оценивается в 300-900 Пк и пока точно не определено [10]. В работе [11] для региона Serpens South было использовано расстояние равное 260 Пк. Наблюдения космическим телескопом Spitzer в инфракрасном диапазоне показывают, что кластеры W40 и Serpens South расположены рядом так, что кажется, что Serpens South является частью региона W40 [12]. Авторы работы [12] предположили, что Serpens South может быть частью Serpens, так как он имеет одинаковую скорость (6 км/с). В работе [13] показано, что кластер Serpens South имеет скорость в диапазоне от 4,5 до 6,5 км/с, что является примерно таким же, как и у Serpens. Анализируя наблюдения линий рекомбинации CII и CO авторы [13] предположили, что он может быть частью молекулярного облака, связанного с W40. Позднее, представленные в работе [14], результаты наблюдений молекулы N_2H^+ за всем регионом W40/Serpens South показали аналогичные скорости по всему региону с разницей по скорости приблизительно в 2 км/с. Следовательно, можно считать, что область W40 является единым комплексом на том же расстоянии, что и Serpens. Широкомасштабные наблюдения излучения ^{12}CO (2–1) и ^{13}CO (2–1) в сторону Aquila Rift и Serpens, представленные в работе [15], показывают два пространственно удлиненных компонента Serpens South и W40 с различными скоростями. Это говорит о том, что дуги и крупномасштабные расширяющиеся оболочки и/или истечения влияют на скорость и играют роль в формировании и эволюции регионов Serpens South и W40 [16].

Наблюдения и архивные данные по комплексу Aquila Rift

Линия поглощения формальдегида H_2CO ($1_{10}-1_{11}$) ($\lambda=6$ см, $\nu_0 = 4829.6594$ МГц) и радиорекомбинационная линия $\text{H}_{110\alpha}$ ($\nu_0 = 4874,1570$ МГц) наблюдалась в молекулярном облаке Aquila в те-

чение февраля 2015 года на 26-м радиотелескопе Нань-Шань Синьцзянской астрономической обсерватории Китайской академии наук. Телескоп расположен на станции Нань-Шань ($\text{E}87^{\circ}10'40''$, $\text{N}4^{\circ}28'22''$). На длине волны H_2CO радиотелескоп имеет ширину диаграммы направленности антенны по уровню половинной мощности – $10'$. Наблюдения проводились при помощи модернизированной программы наблюдений On-The-Fly со средним временем интегрирования в одну минуту для каждой позиции. Центральное положение модели наблюдения составляло $18^{\text{h}}30^{\text{m}}03^{\text{s}} - 2^{\circ}02'40''$ (J2000). При проведении наблюдений использовался 6-сантиметровый приемник с двойной поляризацией, имеющий низкий уровень шума и температуру системы около 23 К. Для того, чтобы свести к минимуму возможные потери информации при регистрации радиоизлучения и повысить качество ее обработки использовался банк цифровых фильтров с 8192 каналами и пропускной способностью на 64 МГц, соответствующий скоростному разрешению 0,48 км/с на уровне частоты 4.852 ГГц. Наблюдаемый масштаб для одного источника не более 1,8 градусов. Размер наблюдаемого молекулярного облака Aquila составил $100' \times 100'$. Отношение сигнал/шум всех обнаруженных точек было лучше, чем 3. Поскольку молекулярный сигнал формальдегида слабый, требовалось длительное время интеграции около 12 минут, что дало хорошее отношение сигнал/шум. Для одновременного наблюдения линии поглощения формальдегида H_2CO и радиорекомбинационной линии $\text{H}_{110\alpha}$ была установлена центральная частота спектрометра на частоте 4851,9102 МГц. Чувствительность системы (DPFU, градус на

единицу потока) составляла 0,116 К/Ян, а светочувствительность основного луча на этой длине волны – 65% [17].

В исследовании были использованы архивные данные, полученные при наблюдениях молекул $^{12}\text{CO}(2-1)$ и $^{13}\text{CO}(2-1)$ с помощью миллиметрового телескопа диаметром 13.7 м в Purple Mountain Observatory (PMO) в апреле и мае 2011 года [18]. Разрешение по скорости для них составляло 0,17 км/с и системная температура этих наблюдений в режиме «On-The-Fly» варьировалась от 250 до 310 К. Сигма уровень шума для данных $^{13}\text{CO}(1-0)$ и $^{12}\text{CO}(1-0)$ составил 0.056 К и 0.122 К, соответственно [19].

Данные 6 см континуума для региона Aquila Rift были получены из китайско-немецкой поляризованной съемки с использованием 25-метрового телескопа Urumqi (National Astronomical Observatories, CAS) [20]. Центральная частота данных была 4.8 ГГц, а полоса пропускания наблюдения была 600 МГц. Разрешение данных составляло $9''.5$, а системная температура была около 22 К в зените.

Интерпретация наблюдений и анализ результатов исследований

Для обработки данных H_2CO и $\text{H}_{110\alpha}$ нами были использованы программные пакеты CLASS и GREG (пакет GILDAS). Данные по $^{13}\text{CO}(J=1-0)$ были адаптированы к $10'$ сетке наблюдения H_2CO .

Интегрированные карты интенсивности H_2CO и $\text{H}_{110\alpha}$ в направлении молекулярного облака Aquila показаны на рисунке 1. На данном рисунке цветные полосы даны в единицах К·км/с.

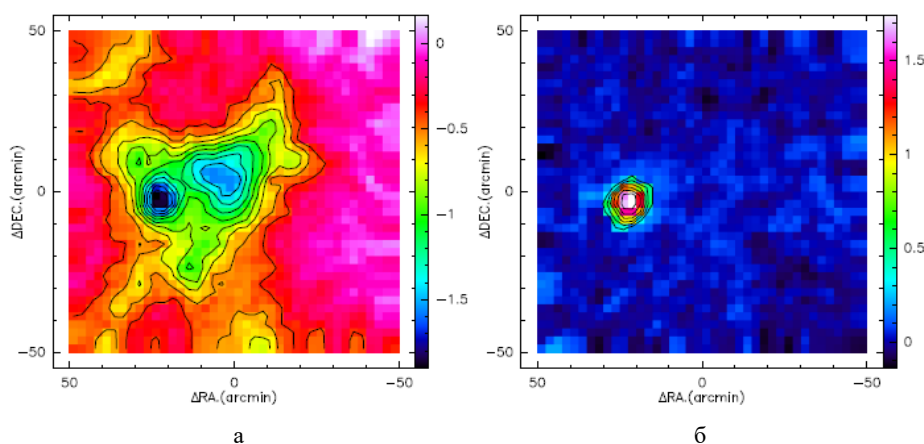


Рисунок 1 – Интегрированные карты интенсивности с областью ионизированного водорода H II с наложением контуров поглощения H_2CO (а) и контуров излучения $\text{H}_{110\alpha}$ (б) в направлении молекулярного облака Aquila: а) уровни контура от -0,4 до -1,8 с шагом -0,15 К·км/с; б) уровни контура от 0,3 до 1,8 с шагом 0,25 К·км/с

На рисунке 1,а мы видим, что на интегрированной карте интенсивности Н II с наложенными контурами линии поглощения H_2CO наблюдаются два ядра, которые соответствуют области W40 и Serpens South. На интегрированной карте интенсивности область Н II с наложенными контурами линии излучения $H_{110\alpha}$ (рисунок 1,б) мы видим только линии, которые указывают на область W40. Карты интенсивности излучения ^{13}CO ($J=1-0$), распределения 6 см радио-континуума и инфракрасного излучения (по данным каталогов IRAS [21] и WISE [22]) в направлении молекулярного облака Aquila, наложенные на интегрированные контуры поглощения H_2CO представлены на рисунке 2. Здесь видно, что кроме ядра, представленного контурами H_2CO , ядер, соответствующих области Serpens South, не наблюдается. В то время как для области W40, мы видим четко выраженное ядро на каждой из интегрированных карт рисунка 2.

нуума и инфракрасного излучения (по данным каталогов IRAS [21] и WISE [22]) в направлении молекулярного облака Aquila, наложенные на интегрированные контуры поглощения H_2CO представлены на рисунке 2. Здесь видно, что кроме ядра, представленного контурами H_2CO , ядер, соответствующих области Serpens South, не наблюдается. В то время как для области W40, мы видим четко выраженное ядро на каждой из интегрированных карт рисунка 2.

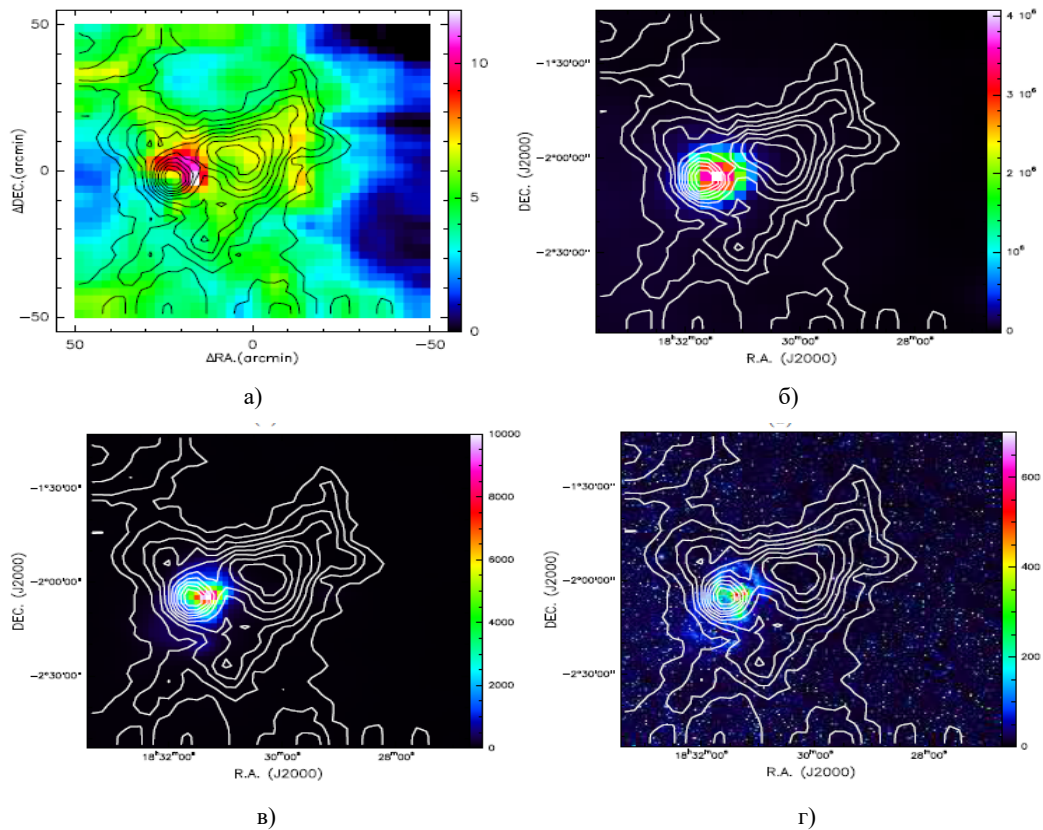


Рисунок 2 – Интегрированные карты интенсивности с контурами линии поглощения H_2CO в направлении молекулярного облака Aquila: а) излучения ^{13}CO ($J=1-0$); б) распределения 6 см радио-континуума; в) инфракрасного излучения на длине волны 60 мкм (IRAS); г) инфракрасного излучения на длине волны 3,4 мкм (WISE). Уровни контура H_2CO уровни контура от -0,4 до -1,8 с шагом -0,15 К·км/с. Цвет представлен в единицах: а) К; б) мК; в) МЯн/стер; г) МЯн/стер

Как видно, из представленных карт для молекулярного облака Aquila (рисунки 1, 2), две области звездообразования W40 и Serpens South наблюдаются только на интегрированной карте областью ионизированного водорода Н II с наложенными контурами линии поглощения H_2CO . Во всех остальных случаях область Serpens South не обнаруживается. Таким образом, мы можем считать, что ядро, выделенное конту-

рами молекулы формальдегида H_2CO , соответствующее региону Serpens South, происходит от космического микроволнового фона.

Карты интенсивности H_2CO при различных скоростях канала, показывающие распределение молекулярного облака, представлены на рисунке 3 со скоростным интервалом 1 км/с. На рисунке цветовая полоса дана в единицах К·км/с. Скорости линий на интегрированных

картах интенсивности H_2CO и ^{13}CO ($J=1-0$) варьируются от 3 до 11 км/с. Градиент скорости составляет несколько км/с для H_2CO (рисунок 3) и ^{13}CO сквозь облако. Как видно из рисунка 3, большая часть региона Serpens South имеет скорость 6 км/с, в то время как большая часть

региона W40 имеет скорость 7 км/с. В панели со скоростью 5 км/с на востоке-западе и на северо-западе наблюдается линейная структура. Аналогично, в панели со скоростью в 8 км/с, можно выделить северо-юго-восточную структуру, проходящую через регион W40.

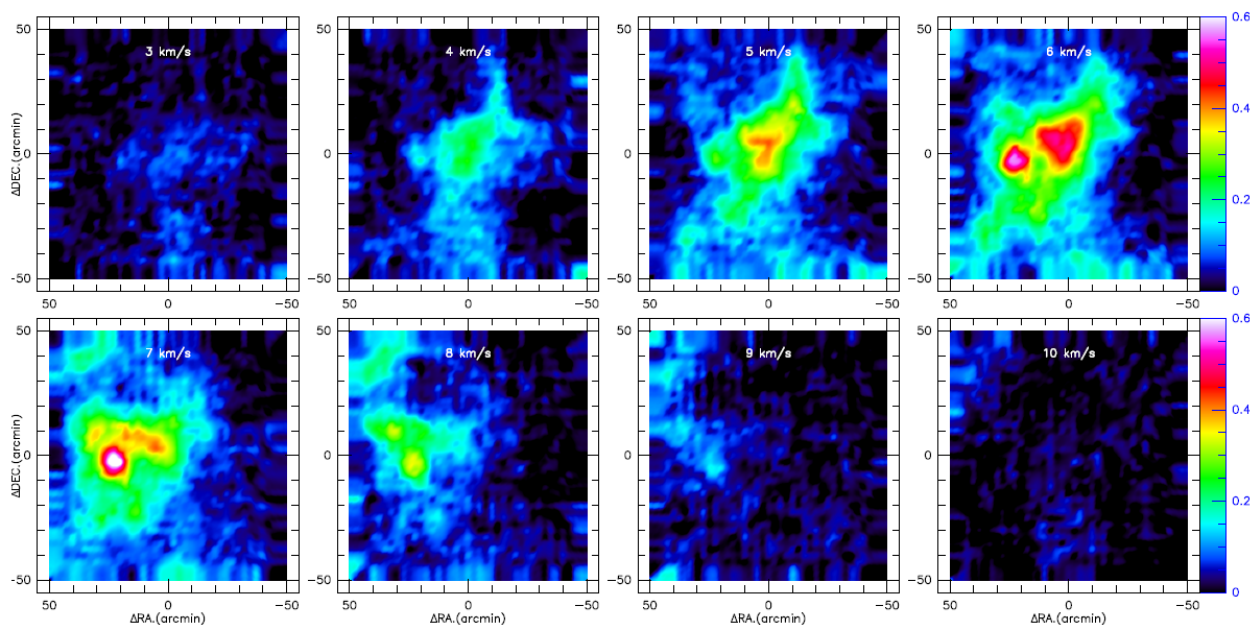


Рисунок 3 – Скорость канала линии H_2CO в направлении молекулярного облака Aquila

На рисунке 4,а представлена гистограмма, показывающая разницу скоростей в совпадающих точках объекта между H_2CO и $H_{110\alpha}$. Мы видим, что для региона Н II вокруг W40 большинство скоростей линии $H_{110\alpha}$ меньше, чем скорости H_2CO . По наблюдениям [23, 24] составляющая скорости 3 км/с может быть не связана с регионом W40.

Однако, построив для области W40 зависимость интенсивности линии поглощения молекулы формальдегида H_2CO от скорости радиорекombинационной линии $H_{110\alpha}$ мы обнаружили их линейную зависимость (рисунок 4,б), которую, в свою очередь, можно объяснить гипотезой, представленной в работе [25]. Согласно гипотезе предположим, что в центре сзади есть действующий источник (кластер WR/OB), и это приводит в движение дугу ионизации в направлении на нас, и когда позиция от центра увеличивается, угол между направлением движения дуги и луча зрения становится больше. Проекция скорости вдоль луча зрения будет уменьшаться.

На рисунке 5 представлены диаграммы положение-скорость для H_2CO и ^{13}CO в направлении молекулярного облака Aquila. Здесь мы можем видеть медленное изменение в диаграмме положение-скорость для H_2CO и градиент скорости для обеих диаграмм в несколько км/с. Скорости вокруг Serpens South ниже, чем скорости вокруг W40.

Далее нами были рассчитаны оптическая глубина и плотность столбца для H_2CO и ^{13}CO . Затем построены диаграммы, которые показывают наличие корреляции между линейными потоками, положением и пиковыми плотностями столбцов H_2CO и ^{13}CO (рисунки 6, 7,а). Гистограмма разности скоростей центров линий поглощения H_2CO и излучения ^{13}CO (рисунок 7,б) также показывает, что скорости H_2CO и ^{13}CO близки друг к другу. Таким образом, мы можем предполагать, что линии поглощения молекулы формальдегида H_2CO и линии излучения ^{13}CO происходят из того же региона облака.

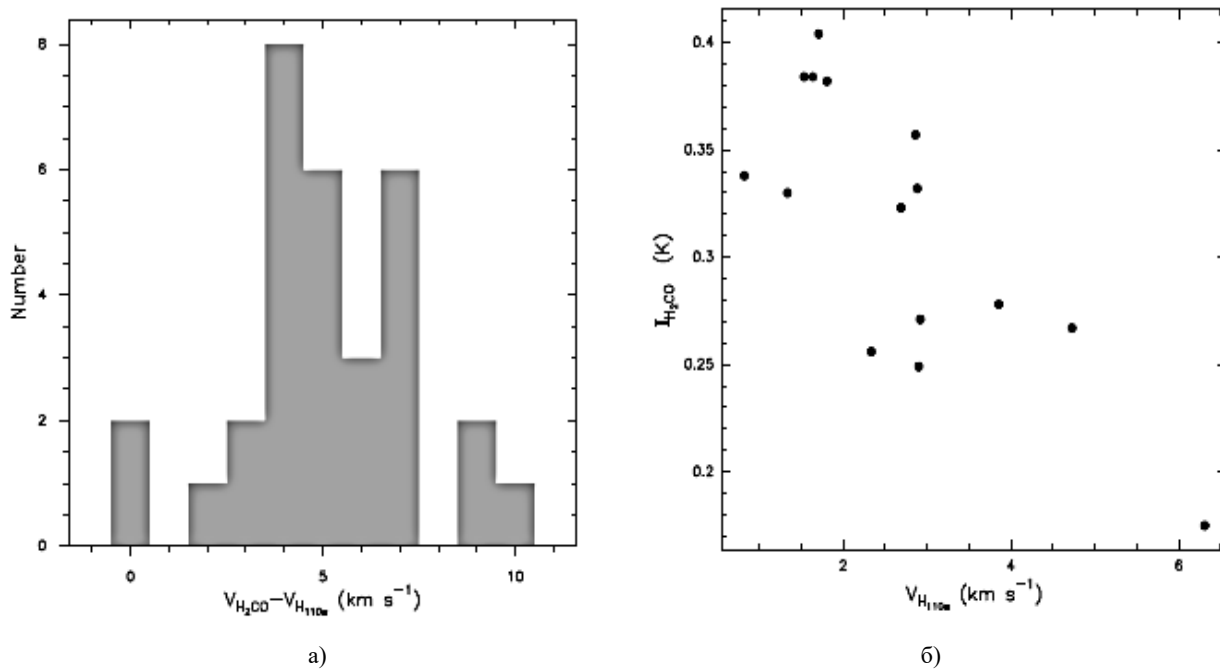


Рисунок 4 – а) Гистограмма разности скоростей центров линий между H_2CO и $\text{H}_{110\alpha}$;
 б) Зависимость интенсивности H_2CO от скорости рекомбинационной линии $\text{H}_{110\alpha}$.
 Коэффициент корреляции $-0,760561$

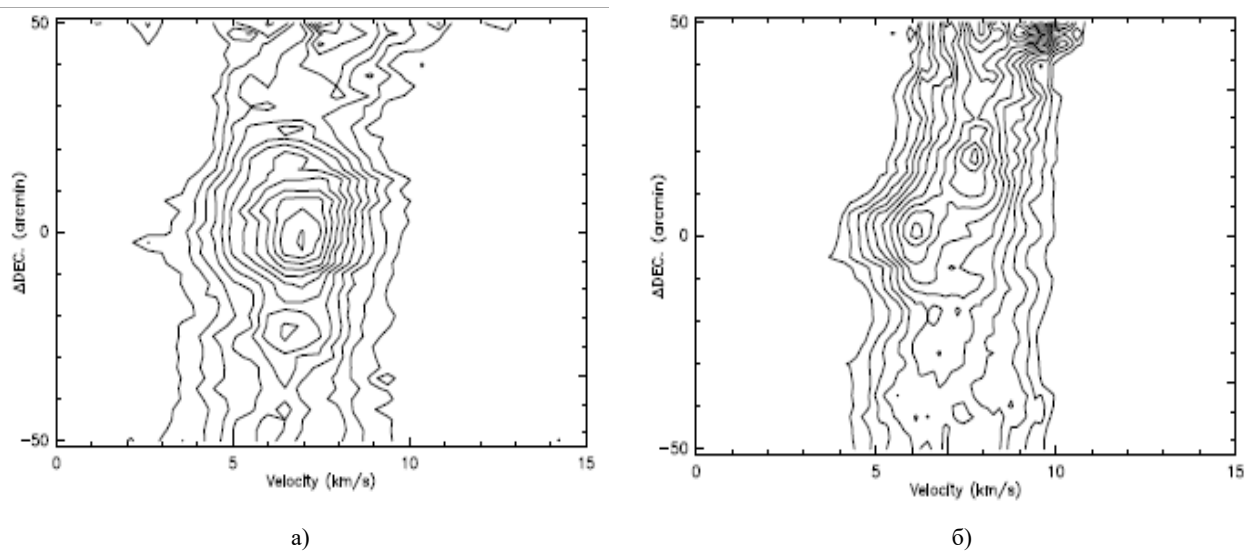


Рисунок 5 – Диаграммы положение-скорость для H_2CO (а) и ^{13}CO (б) в направлении молекулярного облака Aquila:
 а) уровни контура составляют от 0 до 0,1 с шагом 0,01 К; б) уровни контура составляют от 0,3 до 2 с шагом 0,15 К

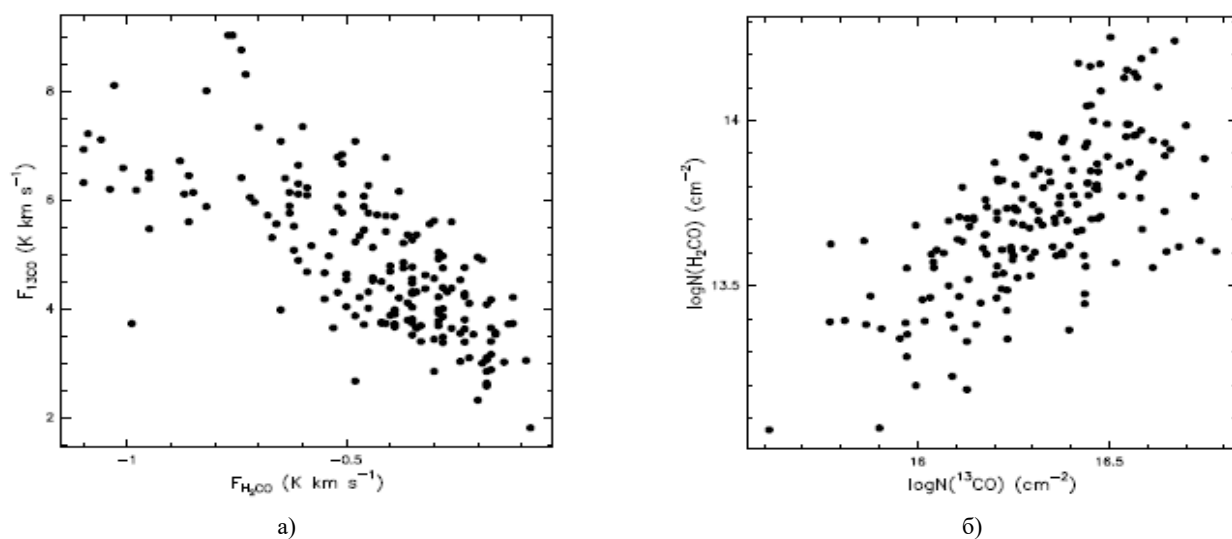


Рисунок 6 – Зависимости линейных потоков H_2CO и ^{13}CO (а) и пиковой плотности столбцов H_2CO от плотности столбцов ^{13}CO (б)

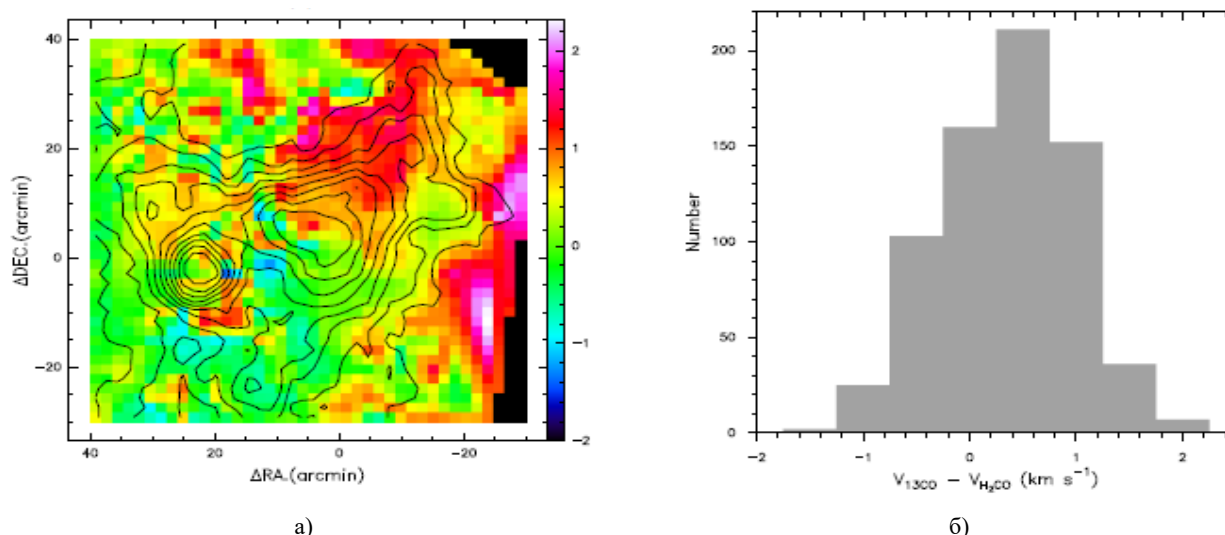


Рисунок 7 – Распределение скорости центра линии в значениях ^{13}CO и H_2CO (а) и гистограмма разности скоростей центров линий между ^{13}CO и H_2CO .
(а) Цветные полосы даны в единицах км/с.

Заключение

Нами впервые проведен анализ радиоастрономических наблюдений молекулы формальдегида H_2CO и рекомбинационной линии $\text{H}_{110\alpha}$ на южных районах W40 и Serpens South молекулярного облака Aquila, которые были получены на 26-м радиотелескопе Нань-Шань Синьцзянской астрономической обсерватории Китайской академии наук.

В работе для комплекса Aquila Rift молекулярного облака Aquila построены карты интенсивности с областью ионизированного водорода H II и наложением контуров H_2CO и $\text{H}_{110\alpha}$; карты излучения ^{13}CO ($J = 1-0$), распределения 6 см радио-континуума и инфракрасного излучения на длинах волн 60 мкм и на 3,4 мкм, наложенные на интегрированные контуры поглощения H_2CO . Показано, что только на интегрированной карте интенсивности H II с наложенными конту-

рами линии поглощения H_2CO наблюдаются две области звездообразования W40 и Serpens South, в то время как во всех остальных построенных картах область звездообразования Serpens South не обнаруживается. Это говорит о том, что ядро, выделенное контурами молекулы формальдегида H_2CO , соответствующее региону Serpens South, происходит от космического микроволнового фона.

Выявлено, что ширина линии поглощения H_2CO , происходящего от космического микроволнового фона, больше, чем ширина линии H_2CO из региона H II. Оптическая глубина и плотность столбца H_2CO от микроволнового фона также немного толще и плотнее, чем для региона ионизированного водорода H II.

Было обнаружено, что для области звездообразования W40 зависимость интенсивности линии поглощения H_2CO от скорости радиорекомбинационной линии $\text{H}_{110\alpha}$ представляет линейную зависимость. Определены оптическая глубина и плотность столбца для H_2CO и ^{13}CO ($J=1-0$). Зависимости линейных потоков и пиковых плотностей столбцов H_2CO и ^{13}CO показали наличие корреляции. Выявлено, что скорости H_2CO и ^{13}CO имеют близкие друг к другу значения. Таким образом, мы можем предполагать, что линии поглощения молекулы формальдегида H_2CO и линии излучения ^{13}CO происходят из одного и того же региона в комплексе Aquila Rift молекулярного облака Aquila.

Литература

- 1 Suzuki H., Yamamoto S., Ohishi M. A survey of CCS, NC5N and NH₃ toward dark cloud cores and the IR production chemistry// *The Astrophysical Journal*. – 1992. – Vol.392. – P.551-570.
- 2 Tang X.D., Henkel C. Kinetic temperature of massive star-forming molecular clumps measured with formaldehyde// *Astronomy & Astrophysics*. – 2018. – Vol.611. – P.17.
- 3 Li Q., Zhou J., Esimbek L. High-mass Outflows Identified from COHRS CO (3–2) Survey// *The Astrophysical Journal*. – 2018. – Vol.867. – P.10.
- 4 Davies R. D., Few R. W. The Large-Scale Characteristics of the Galaxy// *IAU Symp.* – 1979. – Vol.84. – P.81.
- 5 Downes D., Wilson T. L., Bieging J., Wink J. H110 alpha and H₂CO survey of galactic radio sources // *Astronomy and Astrophysics*. – 1980. – Vol. 40. – P. 379-394.
- 6 Tang X. D., Esimbek J., Zhou J. J. The relation of H₂CO, 12CO, and 13CO in molecular clouds// *Astron. Astrophys.* – 2013. – Vol. 551. – P. A28
- 7 Dame T. M., Hartmann D., Thaddeus P. The Milky Way in Molecular Clouds: A New Complete CO Survey// *The Astrophysical Journal*. – 2001. – Vol. 547. – P.792.
- 8 Prato L., Rice E. L., Dame T. M. Where are all the Young Stars in Aquila? // *Handbook of Star Forming Regions*. – 2008. – Vol. 4. – P.18.
- 9 Bontemps S., Andr' e P., Könyves V. The Herschel first look at protostars in the Aquila rift // *Astron.Astrophys.* – 2010. – Vol. 518. – P. L85
- 10 Rodney S.A., Reipurth B. The W40 Cloud Complex// *Handbook of Star Forming Regions*. – 2008. – Vol. 5. – P.683.
- 11 Eiroa C., Djupvik A. A., Casali M. The Serpens Molecular Cloud // *Handbook of Star Forming Regions*. – 2008. – Vol. 5. – P.693.
- 12 Gutermuth R.A., Bourke T.L., Allen L.E. The Spitzergould belt survey of large nearby interstellar clouds// *The Astrophysical Journal*. – 2008. – Vol. 673. – P. L151–L154.
- 13 Zeilik M., Lada C. J. Near-infrared and CO observations of W40 and W48 // *The Astrophysical Journal*. – 1978. – Vol. 222. – P. 896–901.
- 14 Maury A. J., Andr' e P., Men'shchikov A., Könyves V., Bontemps S. The formation of active protoclusters in the Aquila rift: a millimeter continuum view // *Astronomy & Astrophysics*. – 2011. – Vol. 535. – P. 77.
- 15 Nakamura F., Sugitani K., Tanaka T. Cluster Formation Triggered by Filament Collisions in Serpens South // *The Astrophysical Journal Letters*. – 2014. – Vol. 791. – P. L23.
- 16 Nakamura F., Dobashi K., Shimoikura T., Tanaka T., Onishi T. Wide-field 12CO ($J=2-1$) and 13CO ($J=2-1$) Observations toward the Aquila Rift and Serpens Molecular Cloud Complexes. I. Molecular Clouds and Their Physical Properties// *The Astrophysical Journal*. – 2017. – Vol. 837. – P. 154.
- 17 Komesht H. H₂CO and H110 α Observations toward the Aquila Molecular Cloud // *The Astrophysical Journal*. – 2019. – Vol. 874(2). – P. 1-10.
- 18 <http://www.radioast.nsd.c.cn>
- 19 Ortiz-León G. N., Dzib S. A., Kounkel M. A. The Gould's belt distances survey (Gobelins) // *The Astrophysical Journal*. – 2017. – Vol. 834. – P. 143.
- 20 Sun X. H., Reich W., Han J. L. A Sino-German $\lambda 6$ cm polarization survey of the Galactic plane III. The region from 10° to 60° longitude // *A&A*. – 2011. – Vol. 527. – P. A74.
- 21 <http://cdsarc.u-strasbg.fr/viz-bin/cat/II/125>

- 22 <http://vizier.u-strasbg.fr/viz-bin/VizieR?-source=II/328>
 23 Shimoikura T., Dobashi K., Nakamura F. Dense Clumps and Candidates for Molecular Outflows in W40// The Astrophysical Journal. – 2015. –Vol. 806. – P. 201.
 24 Shimoikura T., Dobashi K., Nakamura F., Shimajiri Y., Sugitani K. Cluster formation in the W 40 and Serpens South complex triggered by the expanding H II region// PASJ.– 2018. –Vol. 115. – P. 131.
 25 Wu G., Esimbek J., Zhou J.-J., Han X.-H. H₂CO and H110 α survey toward UCHII regions// Research in Astronomy and Astrophysics.– 2011. –Vol. 11. – P. 63.




References

- 1 H. Suzuki, S. Yamamoto and M. Ohishi. The Astrophysical Journal 392, 551-570 (1992).
- 2 X. D. Tang and C. Henkel. Astronomy & Astrophysics 611, 17 (2018).
- 3 Q. Li, J. Zhou and L. Esimbek. The Astrophysical Journal 867, 10 (2018).
- 4 R. D. Davies and R. W. Few. IAU Symp. 84, 81 (1979).
- 5 D. Downes, T. L. Wilson, J. Bieging and J. Wink. Astronomy and Astrophysics 40, 379-394 (1980).
- 6 X. D. Tang, J. Esimbek and J. J. Zhou. Astron. Astrophys. 551, A28 (2013).
- 7 T. M. Dame, D. Hartmann and P. Thaddeus. The Astrophysical Journal 547, 792 (2001).
- 8 L. Prato, E. L. Rice and T. M. Dame. Handbook of Star Forming Regions I 4, 18 (2008).
- 9 S. Bontemps, P. Andr e and V. K onyves. Astron.Astrophys. 518, L85 (2010).
- 10 S.A. Rodney and B. Reipurth. Handbook of Star Forming Regions 5, 683 (2008).
- 11 C. Eiroa, A.A. Djupvik and M. Casali. Handbook of Star Forming Regions 5, 693 (2008).
- 12 R.A. Gutermuth, T.L. Bourke and L. E. Allen. The Astrophysical Journal 673, L151–L154 (2008).
- 13 M. Zeilik and C.J. Lada. The Astrophysical Journal 222, 896–901 (1978).
- 14 J. Maury, P. Andr e, A. Men'shchikov, V. K onyves and S. Bontemps. Astronomy & Astrophysics 535, 77 (2011).
- 15 F. Nakamura, K. Sugitani and T. Tanaka. The Astrophysical Journal Letters 791, L23 (2014).
- 16 F. Nakamura, K. Dobashi, T. Shimoikura, T. Tanaka and T. Onishi. The Astrophysical Journal 837, 154 (2017).
- 17 T. Komesch. The Astrophysical Journal 874(2), 1-10 (2019).
- 18 <http://www.radioast.nsd.cn>
- 19 G.N. Ortiz-Le on, S.A. Dzib and M.A. Kounkel. The Astrophysical Journal 834, 143 (2017).
- 20 X. H. Sun, W. Reich and J. L. Han. A&A. 527, A74 (2011).
- 21 <http://cdsarc.u-strasbg.fr/viz-bin/cat/II/125>
- 22 <http://vizier.u-strasbg.fr/viz-bin/VizieR?-source=II/328>
- 23 T. Shimoikura, K. Dobashi and F. Nakamura. Astrophys. J. 806, 201 (2015).
- 24 T. Shimoikura, K. Dobashi, F. Nakamura, Y. Shimajiri and K. Sugitani. PASJ 115, 131 (2018).
- 25 G. Wu, J. Esimbek, J.-J. Zhou and X.-H. Han. Research in Astronomy and Astrophysics 11, 63 (2011).

2-бөлім
ПЛАЗМА ФИЗИКАСЫ

Section 2
PLASMA PHYSICS

Раздел 2
ФИЗИКА ПЛАЗМЫ

А.М. Темирбек^{1*} , М.М. Муратов^{1,2} ,
М.Т. Габдуллин³, Т.С. Рамазанов¹ 

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

²Институт прикладных наук и информационных технологий, Казахстан, г. Алматы

³Казахстанско-Британский технический университет, Казахстан, г. Алматы

*e-mail: temirbek.asema@gmail.com

ВЛИЯНИЕ КВАНТОВОЙ НЕЛОКАЛЬНОСТИ И ЭЛЕКТРОННОЙ НЕИДЕАЛЬНОСТИ НА ДЛИНУ РАССЕЯНИЯ ЭЛЕКТРОНА НА АТОМЕ ГЕЛИЯ В ПЛОТНОЙ ПЛАЗМЕ

В данной работе использован экранированный потенциал Хартри – Фока и поляризационный потенциал для описания электрон-гелиевого рассеяния в плотной плазме. Транспортные, парциальные и полные упругие сечения рассчитаны с использованием экранированного потенциала Хартри – Фока, поляризационного и оптического (полного) потенциалов. Используя данные расчетов сечения рассеяния, была найдена длина рассеяния при различных параметрах плотной плазмы с учетом эффектов электронной неидеальности и без учета электронной неидеальности. Эффекты квантовой нелокальности и корреляции свободных электронов учитываются в диэлектрической функции плотной плазмы. Поляризация плазмы приводит к значительному увеличению сечения переноса при малых волновых числах $ka < 2$ по сравнению со случаем рассеяния электронов на изолированном атоме, где a – это среднее расстояние между электронами плазмы. В работе также показано, что учет квантовой нелокальности и корреляций важен при $ka < 2$. Нами было проанализировано и влияние квантовых эффектов на экранирование. Было показано, что поляризация плотной плазмы вокруг атома приводит к дополнительному отталкиванию (притяжению) между электроном (протоном) и атомом гелия.

Ключевые слова: плотная плазма, эффективные потенциалы парного взаимодействия, экранирование

A.M. Temirbek^{1*}, M.M. Muratov^{1,2}, M.T. Gabdullin³, T.S. Ramazanov¹

¹IETP, Al-Farabi Kazakh National University, Kazakhstan, Almaty,

²Institute of Applied Sciences and Information Technologies, Kazakhstan, Almaty

³Kazakh-British Technical University, Almaty, Kazakhstan

*e-mail: temirbek.asema@gmail.com

The effect of quantum nonlocality and electron nonideality on the scattering length of an electron on a helium atom in a dense plasma

In this paper, the screened Hartree – Fock potential and polarization potential are used to describe electron-helium scattering in dense plasma. Transport, partial and total elastic sections are calculated using the screened Hartree-Fock potential, polarization and optical (full) potentials. Using the data of the scattering cross-section calculations, the scattering length was found for different plasma parameters taking into account the effects of electron nonideality and without taking into account electron nonideality. The effects of quantum nonlocality and free electron correlation are taken into account in the dielectric function of the dense plasma. Plasma polarization leads to a significant increase in the transport cross-section at small wave numbers $ka < 2$ compared to the case of electron scattering on an isolated atom, where a is the average distance between plasma electrons. It is shown that accounting for quantum nonlocality and correlations is important for $ka < 2$. The effect of quantum effects on shielding was analyzed. It was shown that the plasma polarization around the atom leads to additional repulsion (attraction) between the electron (proton) and the helium atom.

Key words: dense plasma, the effective potential of pair interaction, screening.

Ә.М. Темірбек^{1*}, М.М. Муратов^{1,2}, М.Т. Габдуллин³, Т.С. Рамазанов¹

¹ЭТФҒЗИ, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Қазақстан, Алматы қ.,

²Қолданбалы ғылымдар және ақпараттық технологиялар институты, Қазақстан, Алматы қ.

³Қазақстан-Британ техникалық университеті, Қазақстан, Алматы қ.

*e-mail: temirbek.asema@gmail.com

Тығыз плазмадағы гелий атомында электронның шашырауы ұзындығына кванттық локалдық емес және электрондық идеалдық емес эффектеріне әсері

Бұл ұсынылған жұмыста тығыз плазмадағы электрон-гелий шашырауын сипаттау үшін Хартри – Фоктың экрандалған потенциалы мен поляризациялық потенциалы пайдаланылды. Транспортты, парциалды және толық серпімділік қималар Хартри – Фоктың экрандалған потенциалды, поляризациялық және оптикалық (толық) потенциалдарды пайдалана отырып есептелген. Шашырау қимасы есебінің деректерін пайдалана отырып, электрондық идеалдық емес әсерлерін ескере отырып және электрондық идеалдық емес әсерлерін ескермегенде плазманың әр түрлі параметрлері кезінде шашыраудың ұзындығы табылды. Еркін электрондардың локалдық емес кванттық және корреляциясының әсері тығыз плазманың диэлектрлік функциясында ескеріледі. Тығыз плазманың поляризациясы оқшауланған атомда электрондардың шашырауы жағдайымен салыстырғанда $ka < 2$ шағын толқындық сандарында тасымалдау қимасының едәуір ұлғаюына әкеледі, мұнда a – плазма электрондарының арасындағы орташа қашықтық. Локалдық емес кванттық және корреляция есебі $ka < 2$ кезінде маңызды екендігі көрсетілген. Сонымен қатар кванттық әсерлердің экрандауға әсері талданды. Алынған нәтижелер екі кесте түрінде келтірілді. Нәтижесінде, атомның айналасындағы плазманың поляризациясы электрон (протон) мен гелий атомының арасында қосымша итеруге (тартылуға) әкелетінін көрсетілді.

Түйін сөздер: тығызплазма, өзара әрекеттесудің тиімді потенциалдары, экрандау.

Введение

Плотная плазма с ионами и атомами гелия важна для понимания эволюции планет и звезд о чем свидетельствуют многочисленные экспериментальные работы зарубежных ученых [1–3]. Например, расслоение в водородно-гелиевых смесях при высоких давлениях в несколько мегабар в недрах таких планет-гигантов, как Сатурн и Юпитер [4, 5] имеет решающее значение для понимания их эволюции и внутренней структуры. Экспериментальные исследования гелия в экстремальных условиях включают ударное сжатие [6-9] и лазерный нагрев [10].

Стоит отметить, что проблема фазового перехода первого порядка в водородно-гелиевых смесях изучалась с использованием химических моделей [11-16] и первопринципных методов моделирования плотностной молекулярной динамики [17-18]. Первопринципный метод моделирования представляет фазовый переход первого порядка в жидкости с критической температурой ниже 2000 К. Однако экспериментальная проверка этого фазового перехода жидкость-жидкость не была получена.

В настоящее время теоретический метод исследования плотной плазмы включает моделирование функционала плотности молекулярной динамики.

Основополагающим параметром плотной плазмы являются транспортные свойства. Следовательно важно знать точные значения транспортных коэффициентов для гелия. Исследование электрон-гелиевого рассеяния позволяет рассчитать транспортные свойства плазмы [19-23]. Точный расчет сечений рассеяния (например, упругих, транспортных) требует построения потенциала парного взаимодействия с учетом экранирования свободными электронами, частичного экранирования связанными электронами и обменных эффектов при взаимодействии рассеяния электрона с оболочкой электрона.

В данной работе обсуждается метод моделирования построения полных электронных (протонных) -He и электронных (протонных) - He + экранированных парных потенциалов взаимодействия в виде суммы производных потенциалов с поляризационным потенциалом и обменным потенциалом. Так же приводятся данные длин рассеяния при различных параметрах плазмы с учетом эффектов электронной неидеальности и без учета электронной неидеальности, используя данные расчетов сечения рассеяния.

Были отражены эффективные потенциалы парного взаимодействия электронного (протонного) -He и электронного (протонного) -He +,

возникающего в результате частичного экранирования поля ядра гелия связанными электронами, с учетом как экранирования свободными заряженными частицами, так и квантово-дифракционного эффекта в плотной плазме. Было проанализировано влияние квантовых эффектов на экранирование. Было показано, что поляризация плазмы вокруг атома приводит к

дополнительному отталкиванию (притяжению) между электроном (протоном) и атомом гелия.

Метод моделирования

В данной работе был использован экранированный потенциал Хартри-Фока (ХФ) [24], измененный для учета электронных корреляций и представленный в следующем виде:

$$\Phi_{HF} = -\frac{e^2}{r} \left[a_1 \xi(a_1 r) + a_2 \xi(a_2 r) + a_3 \xi\left(\frac{\alpha_1 + \alpha_2}{2}, r\right) \right], \quad (1)$$

$$\xi(a, r) = \exp(-\alpha r) [c_1(\alpha) + c_2(\alpha)r - c_3(\alpha)r] + \exp(-Ar)c_4(\alpha) + \exp(-Br)c_5(\alpha), \quad (2)$$

$$A^2 = \frac{k_i^2 + 1/\lambda^2}{2} \left[1 + \sqrt{1 - \left(\frac{2k_D}{\lambda(k_i^2 + 1/\lambda^2)} \right)} \right], \quad B^2 = \frac{k_i^2 + 1/\lambda^2}{2} \left[1 - \sqrt{1 - \left(\frac{2k_D}{\lambda(k_i^2 + 1/\lambda^2)} \right)} \right], \quad (3)$$

Г

$$\begin{aligned} \text{де } \lambda^2 &= \frac{\tilde{a}_2 / \tilde{a}_0}{1 + 2\pi e^2 \gamma / \tilde{a}_0}, \\ k_D^2 &= \lambda_D^{-2} = k_S^2 + k_i^2, \quad k_i^2 = \\ &= 4\pi n_i Z_i^2 e^2 / k_B T_i, \quad k_S^2 = k_Y^2 / (1 + 2\pi e^2 \gamma / \tilde{a}_0), \\ \gamma &= -\frac{k_F^2}{4\pi e} \frac{\partial^2 n_e f_{xc}}{\partial n_e^2} - \text{коэффициент зависящий от} \end{aligned}$$

плотности обменно-корреляционной свободной энергии электронов, $\tilde{a}_0 = -2\pi e^2 / k_Y^2$, $k_Y^2 = k_{TF}^2 \theta^{1/2} I_{-1/2}(\eta) / 2$ – обратная длина экранирования, η – химический потенциал в единицах $k_B T_e$, I_ν – Ферми интеграл порядка ν .

Константы в эффективных потенциалах парного взаимодействия имеют следующий вид

$$\begin{aligned} c_1(\alpha) &= -\frac{\alpha^4}{(\alpha^2 - A^2)(B^2 - A^2)} + \frac{\alpha^4}{(\alpha^2 - B^2)(B^2 - A^2)} + \frac{\alpha^2}{\lambda_{ee}^2 (\alpha^2 - A^2)(B^2 - A^2)} - \\ &- \frac{\alpha^2}{\lambda_{ee}^2 (\alpha^2 - B^2)(B^2 - A^2)} + \frac{3\alpha^6 C}{(B^2 - A^2)} - \frac{2\alpha^4 D}{(B^2 - A^2)} - \frac{3\alpha^6 C_1}{(B^2 - A^2)} + \frac{2\alpha^4 D_1}{\lambda_{ee}^2 (B^2 - A^2)} - \\ &- \frac{2\alpha^4 C}{\lambda_{ee}^2 (B^2 - A^2)} + \frac{\alpha^2 D}{\lambda_{ee}^2 (B^2 - A^2)} + \frac{2\alpha^4 C_1}{\lambda_{ee}^2 (B^2 - A^2)} - \frac{\alpha^2 D}{\lambda_{ee}^2 (B^2 - A^2)}, \\ c_2(\alpha) &= \frac{\alpha^5 D}{2(B^2 - A^2)} + \frac{\alpha^7 C_1}{2(B^2 - A^2)} + \frac{\alpha^5 C}{2\lambda_{ee}^2 (B^2 - A^2)} + \frac{\alpha^3 D_1}{2\lambda_{ee}^2 (B^2 - A^2)}, \\ c_3(\alpha) &= \frac{\alpha^7 C}{2(B^2 - A^2)} + \frac{\alpha^3 D_1}{2(B^2 - A^2)} + \frac{\alpha^3 D}{2\lambda_{ee}^2 (B^2 - A^2)} + \frac{\alpha^5 C_1}{2\lambda_{ee}^2 (B^2 - A^2)}, \end{aligned}$$

$$c_4(\alpha) = \frac{A^4}{(\alpha^2 - A^2)(B^2 - A^2)} - \frac{A^2}{\lambda_{ee}^2(\alpha^2 - A^2)(B^2 - A^2)} + \frac{\alpha^2 A^4 E}{(B^2 - A^2)} - \frac{\alpha^2 A^2 E}{\lambda_{ee}^2(B^2 - A^2)},$$

$$c_5(\alpha) = -\frac{B^4}{(\alpha^2 - B^2)(B^2 - A^2)} + \frac{B^2}{\lambda_{ee}^2(\alpha^2 - B^2)(B^2 - A^2)} - \frac{\alpha^2 B^4 E_1}{(B^2 - A^2)} + \frac{\alpha^2 B^2 E_1}{\lambda_{ee}^2(B^2 - A^2)},$$

где

$$C = -\frac{1}{(\alpha^2 - A^2)^2}, \quad C_1 = -\frac{1}{(\alpha^2 - B^2)^2},$$

$$D = -\frac{A^2 - 2\alpha^2}{(\alpha^2 - A^2)^2}, \quad D_1 = -\frac{B^2 - 2\alpha^2}{(\alpha^2 - B^2)^2},$$

$$E = -\frac{1}{(\alpha^2 - A^2)^2}, \quad E_1 = -\frac{1}{(\alpha^2 - B^2)^2},$$

Используя метод мультипольного разложения [25] с учетом поправок за счет электронных корреляций, была получена следующая формула для поляризационного взаимодействия атома с электроном в квантовой плазме:

$$\Phi_p(R) = -\frac{\bar{\alpha}e^2}{2(R^2 + r_c^2)^2} [f_2(R)]^2, \quad (4)$$

$$f_2(R) = \frac{1}{(k_i^2 + 1/\lambda^2)\sqrt{1 - (2k_D/\lambda(k_i^2 + 1/\lambda^2))^2}} \left[\left(\frac{1}{\lambda^2} - B^2 \right) (1 + RB) \exp(-RB) - \left(\frac{1}{\lambda^2} - A^2 \right) (1 + RA) \exp(-RA) \right]. \quad (5)$$

где $\bar{\alpha}, r_c$ – коэффициент атомной поляризации и радиус обрезания, соответственно.

Оптический (полный) потенциал определяется как сумма экранированного ХФ потенциала (1), экранированного поляризационного потенциала (4)

и обменного потенциала φ_{ex} , появляющегося вследствие взаимодействия рассеивающегося электрона с электронами оболочки атома.

Фазовые сдвиги рассчитаны, используя уравнение Калоджеро [26]:

$$\frac{d\delta_l^{\alpha\beta}(k, r)}{dr} = -\frac{1}{k} U(r) \left[\cos \delta_l^{\alpha\beta}(kr) j_l(k, r) - \sin \delta_l^{\alpha\beta}(k, r) n_l(k, r) \right]^2, \quad (6)$$

с граничным условием $\delta_l^{\alpha\beta}(k, 0) = 0$, где k – волновое число, l показывает орбитальное квантовое число, α с β обозначает тип частиц, участвующих в бинарном столкновении (в нашем случае электрон и гелий), j_l и n_l – функции Риккати-Бесселя, и $U(r)$ – парный потенциал взаимодействия.

Уравнения для расчета парциального и полного упругого сечения, и транспортного сечения имеют следующий вид:

$$Q_l^{\alpha\beta}(k) = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l^{\alpha\beta}(k), \quad (7)$$

$$Q^{\alpha\beta}(k) = \sum_l Q_l^{\alpha\beta}(k),$$

$$Q_{\alpha\beta}^T(k) = \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (l+1) \sin^2 (\delta_l^{\alpha\beta}(k) - \delta_{l+1}^{\alpha\beta}(k)), \quad (8)$$

где $\delta_l^{\alpha\beta}(k) \equiv \delta_l^{\alpha\beta}(k, r \rightarrow \infty)$. Уравнение Калоджеро было решено использованием метода Рунге-Кутта четвертого порядка.

Результаты и обсуждения

Для начала рассмотрим случай $\gamma = 0$. Радиус обрезания задан равным $0.9 \times a_B$ и поляризационный коэффициент принят равным $1.3831 \times a_B^3$. При малом значении волнового числа (предел $k \rightarrow 0$) фазовые сдвиги

удовлетворяют известную теореме Левинсона [27].

В случае, когда потенциал взаимодействия убывает быстрее чем $1/r^3$, при малых энергиях ($ka < 1$):

$$Q(ka \ll 1) \approx 4\pi a_s^2, \quad (9)$$

где a_s – длина рассеяния при $l=0$.

Используя вышеприведенные данные расчетов сечения рассеяния, была найдена длина рассеяния при различных параметрах плазмы с учетом эффектов электронной неидеальности и без учета электронной неидеальности. Результаты расчетов приведены в таблицах 1 и 2.

Таблица 1 – Длина рассеяния a_s определенная по формуле (9) при $\theta=0.6$ и $r_s=2.0$ в единицах $(a\sqrt{\pi})$: I – результаты, полученные, используя потенциал Хартри-Фока, II – данные, рассчитанные для поляризационного потенциала, III – результаты, вычисленные для оптического потенциала (Хартри-Фок плюс поляризационный потенциал); $\lambda \neq 0$ соответствует случаю учета электронных корреляций и $\lambda=0$ данные без учета электронных корреляций

	I	II	III
$\lambda \neq 0$	0.9	0.16566	0.8639
$\lambda = 0$	0.7	1.7449	0.68919

Таблица 2 – Длина рассеяния a_s определенная по формуле (9) при $\theta=1.0$, $r_s=2.0$ в единицах $(a\sqrt{\pi})$: I – результаты, полученные, используя потенциал Хартри-Фока, II – данные, рассчитанные для поляризационного потенциала, III – результаты, вычисленные для оптического потенциала (Хартри-Фок плюс поляризационный потенциал); $\lambda \neq 0$ соответствует случаю учета электронных корреляций и $\lambda=0$ данные без учета электронных корреляций

	I	II	III
$\lambda \neq 0$	2.1686	0.19349	0.73539
$\lambda = 0$	1.20179	0.1698	0.65622

Зная длину рассеяния, можно найти эффективный радиус действия (так же известный как эффективный радиус непроницаемости) атома r_0 по формуле Блата-Джексона:

$$kctg\delta_0 = -\frac{1}{a_s} + \frac{k^2 r_0}{2}, \quad (10)$$

где $ka \ll 1$.

Выводы

В данной работе представлен экранированный потенциал Хартри-Фока и поляризационные потенциалы для оптической модели с учетом квантовой нелокальности, а также электронных корреляций. Было рассмотрено влияние квантовой нелокальности и электронных корреляций на фазовые сдвиги рассеяния, частичное (полное) поперечное сечение и транспортное поперечное сечение вследствие модификации экранирования. В случае $\Gamma < 1$ основной

результат состоит в том, что в плотной, частично вырожденной плазме на частичное (полное) упругое и транспортное сечения сильно влияет квантовая нелокальность при $ka < 2$. Так же приведены таблицы длин рассеяния, которые позволяют определить эффективный радиус непроницаемости атома.

При параметрах плазмы $\Gamma > 1$ необходимо учитывать как квантовую нелокальность, так и электронные корреляции. В этом режиме вышеупомянутые эффекты оказывают существенное влияние на сечение переноса при энергиях, соответствующих $ka < 2$, тогда как изменение парциального и полного упругих сечений наблюдалось для всех рассмотренных значений волнового числа, то есть $0 < ka < 10$.

Благодарность

Работа была выполнена при поддержке Министерства образования и науки Республики Казахстан по программно-целевому финансированию BR05236730.

Литература

- 1 Fortney J. J. Characterizing the structure of giant planets // *Contrib. Plasma Phys.* – 2013. – Vol.53. – P.385–391.
- 2 Monserrat B., Drummond N.D., Pickard C.J., Needs R.J. Electron–phonon coupling and the metallization of solid helium at terapascal pressures // *Phys.Rev.Lett.* – 2014. – Vol.112. – Art.No.055504.
- 3 Militzer B. Equation of state calculations of hydrogen–helium mixtures in solar and extrasolar giant planets // *Phys.Rev.B.* – 2013. – Vol.87. – Art.No.014202.
- 4 Lorenzen W., Holst B., Redmer R. Metallization in hydrogen–helium mixtures // *Phys. Rev. B.* – 2011. – Vol. 84. – Art.No.235109.
- 5 Lorenzen W., Holst B., Redmer R. Demixing of hydrogen and helium at megabar pressures // *Phys.Rev Lett.* – 2009. – Vol.102. – Art.No.115701
- 6 Nellis W.J., Holmes N.C., Mitchell A.C. Shock compression of liquid helium to 56 GPa (560 kbar) // *Phys.Rev.Lett.*– 1984. – Vol.53. – P.1248.
- 7 Ternovoi V.Ya., Filimonov A.S., Pyalling A.A., et al., in “Shock Compression of Condensed Matter” – 2001, Ed. By M.D. Furnish, N.N. Thadhani, and Y. Horie. – 2002. – P.107.
- 8 Eggert J., Brygoo S., Loubeyre P., McWilliams R.S., Celliers P.M., Hicks D.G., Boehly T.R., Jeanloz R., Collins G.W. Hugoniot data for helium in the ionization regime // *Phys. Rev. Letters.*–2008. – Vol.100. – Art.No.124503.
- 9 Zhernokletov M.V., Gryaznov V.K., Arinin V.A., Buzin V.N., Davydov N.B., Il’kaev R.I., Iosilevskiy I.L., Mikhailov A. L., Novikov M.G., Khrustalev V.V., Fortov V.E. Quasi–isentropic compression of dense gaseous helium at pressures up to 500 GPa// *JETP Letters.*–2012.–Vol. – 96. –P.432–436.
- 10 McWilliams R.S., Daltona D.A., Kon’opkovra Z., Mohammad F. Mahmooda, Goncharova A.F. // *Proc. Natl. Acad.Sci.* – 2015. – Vol.112. – P.925.
- 11 Schlanges M., Bonitz M., Tchttschjan A. Plasma Phase Transition in Fluid Hydrogen–Helium Mixtures // *Contrib. Plasma Phys.* – 1995.–Vol.35. – P.109–125.
- 12 Ebeling W., Richert W. Plasma phase transition in hydrogen // *Phys. Lett. A.* – 1985.–Vol.108.– P.80–82.
- 13 Saumon D., Chabrier G. Fluid hydrogen at high density: The plasma phase transition // *Phys. Rev. Lett.* – 1989. – Vol. 62. – P.2397.
- 14 Reinholz H., Redmer R., Nagel S. Thermodynamic and transport properties of dense hydrogen plasmas // *Phys. Rev. E.* – 1995. – Vol.52. – P.5368–5386.
- 15 Beule D., Ebeling W., Föörster A., Juranek H., Nagel S., Redmer R., Röpke G. Equation of state for hydrogen below 10000 k: from the fluid to the plasma // *Phys. Rev. B.* – 1999. – Vol.59. – Art.No.14177.
- 16 Holst B., Nettelmann N., Redmer R. Equation of state for dense hydrogen and plasma phase transition // *Contrib. Plasma Phys.* – 2007. – Vol. – 47.–P.368–374.
- 17 Morales M.A., Schwegler E., Ceperley D., Pierleoni C., Hamel S., Caspersen K. Phase separation in hydrogen–helium mixtures at Mbar pressures // *Proc.Natl. Acad. Sci.* – 2009. – Vol.106. – P.1324–1329.
- 18 Lorenzen W., Holst B., Redmer R. First–order liquid–liquid phase transition in dense hydrogen // *Phys. Rev. B.* –2010.–Vol. 82. – P.195107.
- 19 Kodanova S.K., Ramazanov T.S., Issanova M.K., Nigmatova G.N., Moldabekov Zh.A. Investigation of coulomb logarithm and relaxation processes in dense plasma on the basis of effective potentials // *Contrib. Plasma Phys.* – 2015. – Vol.55. – P. 271–276.
- 20 Ramazanov T.S., Kodanova S.K., Moldabekov Zh.A., Issanova M.K. Dynamical properties of non–ideal plasma on the basis of effective potentials // *Phys. Plasmas.*–2013.–Vol. 20.–P. 112702.
- 21 Kodanova S.K., Ramazanov T.S., Bastykova N.Kh., Moldabekov Zh.A. Effect of dust particle polarization on scattering processes in complex plasmas // *Phys. Plasmas.*–2015.–Vol. 22. –P.063703.
- 22 Baimbetov F.B., Nurekenov K.T., Ramazanov T.S. Electrical conductivity and scattering sections of strongly coupled hydrogen plasmas // *Physica A.* – 1996. – Vol. 226. – P.181–190.
- 23 Ramazanov T.S., Dzhumagulova K.N., Gabdullin M.T., Akbar A.Zh., Redmer R., J. A scattering cross–section and ionization equilibrium in dense metal plasmas // *Phys. A: Math. Theor.*–2009. – Vol. 42. – P. 14049.
- 24 Ramazanov T.S., Amirov S.M., Moldabekov Z.A. Effective Potentials for Charge–Helium and Charge–Singly–Ionized Helium Interactions in a Dense Plasma // *Contrib. Plasma Phys.* – 2016. – Vol. 56. – P. 411–418.
- 25 Ramazanov T.S., Moldabekov Z.A., Gabdullin M.T. Multipole expansion in plasmas: Effective interaction potentials between compound particle s// *Phys. Rev. E*– 2016. – Vol. 93. –P. 053204.
- 26 Calogero F. Variable Phase Approach to Potential Scattering.– Academic Press, New York. – 1967.
- 27 Newton R.G. The spectrum of the Schrödinger S matrix: Low energies and a new Levinson theorem // *Ann. Phys.* – 1989. – Vol.194. – P.173–196.

References

- 1 J.J. Fortney, *Contrib. Plasma Phys*, 53, 385–391 (2013).
- 2 B. Monserrat, N.D. Drummond, C.J. Pickard, R.J. Needs, *Phys. Rev. Lett*, 112, 055504 (2014).
- 3 B. Militzer, *Phys. Rev. B.*, 87, 014202 (2013).
- 4 W. Lorenzen, B. Holst, R.Redmer, *r Phys. Rev. B*, 84, 235109 (2011).
- 5 W. Lorenzen, B. Holst, R.Redmer, *Phys. Rev. Lett.*, 102, 115701 (2009).
- 6 W.J. Nellis, N.C. Holmes, A.C. Mitchell, et al., *Phys. Rev. Lett.* 53, 1248 (1984).
- 7 V.Ya. Ternovoi, A.S. Filimonov, A.A. Pyalling, et al., in “Shock Compression of Condensed Matter” – 2001, Ed. By M.D. Furnish, N.N. Thadhani, and Y. Horie, p.107 (2002).

- 8 J. Eggert, S. Brygoo, P. Loubeyre, R.S. McWilliams, P.M. Celliers, D.G. Hicks, T.R. Boehly, R. Jeanloz, and G.W. Collins, *Phys. Rev. Letters* 100, 124503 (2008).
- 9 M.V. Zhernokletov, V.K. Gryaznov, V.A. Arinin, V.N. Buzin, N.B. Davydov, R.I. Il'kaev, I.L. Iosilevskiy, A. L. Mikhailov, M.G. Novikov, V.V. Khrustalev, and V.E. Fortov, *JETP Letters*, 96, 432-436 (2012).
- 10 R.S. McWilliams, D.A. Daltona, Z. Kon'opkova, Mohammad F. Mahmooda, and A.F. Goncharova, *Proc. Natl. Acad.Sci.* 112, 7925 (2015).
- 11 M. Schlanges, M. Bonitz, A. Tchttschjan, *Contrib. Plasma Phys.* 35, 109-125 (1995).
- 12 W. Ebeling and W. Richert, *Phys. Lett. A* 108, 80-82 (1985).
- 13 D. Saumon and G. Chabrier, *Phys. Rev. Lett.* 62, 2397 (1989).
- 14 H. Reinholz, R. Redmer, and S. Nagel, *Phys. Rev. E* 52, 5368-5386 (1995).
- 15 D. Beule, W. Ebeling, A. Fëorster, H. Juranek, S. Nagel, R. Redmer, and G. Rëopke, *Phys. Rev. B* 59, 14177 (1999).
- 16 B. Holst, N. Nettelmann, and R. Redmer, *Contrib. Plasma Phys.* 47, 368-374 (2007).
- 17 M.A. Morales, E. Schwegler, D. Ceperley, C. Pierleoni, S. Hamel, and K. Caspersen, *Proc. Natl. Acad. Sci.* 106, 1324-1329 (2009).
- 18 W. Lorenzen, B. Holst, and R. Redmer, *Phys. Rev. B* 82, 195107 (2010).
- 19 S.K. Kodanova, T.S. Ramazanov, M.K. Issanova, G.N. Nigmatova, and Zh.A. Moldabekov, *Contrib. Plasma Phys.* 55, 271-276 (2015).
- 20 T.S. Ramazanov, S.K. Kodanova, Zh.A. Moldabekov, and M.K. Issanova, *Phys. Plasmas* 20, 112702 (2013).
- 21 S.K. Kodanova, T.S. Ramazanov, N.Kh. Bastykova, and Zh.A. Moldabekov, *Phys. Plasmas* 22, 063703 (2015).
- 22 F.B. Baimbetov, K.T. Nurekenov, T.S. Ramazanov, *Physica A* 226, 181-190 (1996).
- 23 T.S. Ramazanov, K.N. Dzhumagulova, M.T. Gabdullin, A.Zh. Akbar, and R. Redmer, *J. Phys. A: Math. Theor.* 42, 214049 (2009).
- 24 T.S. Ramazanov, S.M. Amirov, Z.A. Moldabekov, *Contrib. Plasma Phys.* 56, 411-418 (2016).
- 25 T.S. Ramazanov, Z.A. Moldabekov, M.T. Gabdullin, *Phys. Rev. E*, 93, 053204 (2016).
- 26 F. Calogero *Variable Phase Approach to Potential Scattering*, Academic Press, New York (1967).
- 27 R.G. Newton, *Ann. Phys.* 194, 173 (1989).

3-бөлім
**КОНДЕНСИРЛЕНГЕН КҮЙ ФИЗИКАСЫ
ЖӘНЕ МАТЕРИАЛТАНУ ПРОБЛЕМАЛАРЫ.
НАНОҒЫЛЫМ**

Section 3
**CONDENSED MATTER PHYSICS AND
MATERIALS SCIENCE PROBLEMS.
NANOSCIENCE**

Раздел 3
**ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ
И ПРОБЛЕМЫ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ.
НАНОНАУКА**

**G. Paskalov^{1,2*}, R. Jarvis², L. Adjarova³,
E. Benova⁴ , and B. Harmison²**

¹Plasma Microsystems LLC, USA, Los Angeles,

²ELXUS, LLC, Oak Hill, USA, Virginia

³Energy Agency of Plovdiv, Bulgaria, Plovdiv

⁴Sofia University "St. Kliment Ohridski, Bulgaria, Sofia

*e-mail: george.paskal44@gmail.com

POROUS MATERIAL INTERACTIONS WITH RF PLASMA

The impact of plasma on the material is carried out as a result of a number of complexes, interrelated processes of energy, mass and charge exchange of plasma particles with the substrate. The result of such interactions are desorption of atoms and molecules from substrate, sputtering and evaporation of the particulate material, structure and phase state changes. During the plasma treatment, materials interact with active and inactive plasma particles, having high kinetic or potential energy. There are physical and chemical interaction of particles. Physical interaction of the particles is mostly by kinetic energy, which can exceed the heat by several orders of magnitude. The charged particles also have a high potential energy - the energy of recombination. In this regard, the particles upon collision with a physically solid material can spray the solid material.

The paper presents the study of low-temperature surface modification interactions with a porous material. These are low energy sources of induction and capacitive radio-frequency discharges at a pressure of 0.1 - 2 torr, are used. The objects of research are the useful creation of modified carbon sorbents.

Key words: low pressure discharge, surface modification.

Г. Паскалов^{1,2*}, Р. Ярвис², Л. Аджарова³, Е. Бенова⁴, Б. Хармисон²

¹ЖШС «Plasma Microsystems», АҚШ, Лос-Анджелес қ.,

²ELXUS, LLC, АҚШ, Оук Хилл, Вирджиния қ.

³Пловдив энергетика агенттігі, Болгария, Пловдив қ.

⁴Климент Охридский әулие атындағы София университеті, Болгария, София қ.

*e-mail: george.paskal44@gmail.com/

Кеуекті материалдың жоғары жиілікті плазмамен әрекеттесуі

Плазманың материалға әсері энергия, масса және бөлшектерін төсеммен қайта зарядтау бірқатар кешенді өзара байланысты процестерінің нәтижесінде жүзеге асырылады. Мұндай өзара әрекеттесудің нәтижесі атомдар мен молекулалардың төсемнен десорбция процесі, шашырау және бөлшектер түрінде материалдың булануы, сондай-ақ оның құрылымы мен фазалық күйінің өзгеруі болып табылады. Плазмалық өңдеу кезінде материалдар жоғары кинетикалық немесе потенциалдық энергиясы бар белсенді және белсенді емес плазмалық бөлшектермен әрекеттесетіні белгілі. Бөлшектердің арасында физикалық және химиялық әрекеттесулер болатыны көп зерттеулермен дәлелденген және айқын. Негізінен физикалық өзара әрекеттесу кинетикалық энергияның әсерінен болады, сондықтан ол жылу энергиясының көлемінен бірнеше рет асып түседі. Зарядталған бөлшектер жоғары потенциалдық энергиясына ие екені белгілі, мұны рекомбинация энергиясы деп атайды. Осыған байланысты бөлшектер физикалық қатты материалмен соқтығысқанда қатты материалды шашыратуы мүмкін.

Бұл ұсынылған мақалада біз кеуекті материалмен төмен температуралық модификациялық әрекеттесуді зерттеу нәтижелерін келтірдік. 0,1 - 2 торр қысымындағы индуктивті және сыйымды радиожілік разрядтарының төмен энергия көздері қолданылады. Зерттеу нысаны болып өзгертілген көміртегі сорбенттерінің түзілуі табылады.

Түйін сөздер: төмен қысымды разряд, беттік модификация.

Г. Паскалов^{1,2*}, Р. Ярвис², Л. Аджарова³, Е. Бенова⁴, Б. Хармисон²

¹ТОО «Plasma Microsystems», США, г. Лос-Анджелес,

²ELXUS, LLC, Оук Хилл, США, г. Вирджиния

³Энергетическое агентство Пловдива, Болгария, г. Пловдив

⁴Софийский университет им. Святого Климента Охридского, Болгария, г. София

*e-mail: george.paskal44@gmail.com

Взаимодействие пористого материала с высокочастотной плазмой

Воздействие плазмы на материал осуществляется в результате ряда комплексов, взаимосвязанных процессов энерго-, массо- и перезарядки частиц плазмы с подложкой. Результатом таких взаимодействий является десорбция атомов и молекул с подложки, распыление и испарение материала в виде частиц, а также изменение структуры и фазового состояния. Во время плазменной обработки материалы взаимодействуют с активными и неактивными частицами плазмы, имеющими высокую кинетическую или потенциальную энергию. Доказано, что существуют физическое и химическое взаимодействие частиц, где при этом физическое взаимодействие частиц происходит, в основном, за счёт кинетической энергии, которая может на несколько порядков превышать тепловую энергию. Заряженные частицы также обладают высокой потенциальной энергией, так называемой энергией рекомбинации. В связи с этим частицы при столкновении с физически твёрдым материалом могут распылять твёрдый материал. В данной статье представлены результаты исследования низкотемпературных модификационных взаимодействий с пористым материалом. Используются малоэнергетические источники индукционных и ёмкостных радиочастотных разрядов при давлении 0,1 - 2 торр. Объектами исследований являются образования модифицированных углеродных сорбентов.

Ключевые слова: разряд низкого давления, модификация поверхности.

Introduction

This paper is focused on the changes of the properties of solid materials with porous structures after their interaction with the low-pressure plasma. As the object of study is carbonaceous sorbents made from agricultural waste [1-2] and designed by the authors for several advantageous uses. The surface modification capabilities range from differently charged carbon to additive chemistries for specific adsorbent applications.

Research methods

In the first stage of research RF discharge plasma surface activation is performed on carbonaceous sorbents. The sorbent matrix is based on carbon and silicon compound (C-Si) or carbon and potassium (C-K) and represent the longitudinal size of the granules 2 - 7 mm and a thickness of 1 mm. The matrix of the sorbent is treated in the different zones of plasma discharge. In case of ICP (inductively coupled plasma) the matrix passed through the discharge zone or introduced into the plasma jet. In the case of capacitive discharge, matrix is processed in a rotating drum, or in the interelectrode space (between flat electrodes). Also, the potential exists to have a 'free space' processing vessel.

Research background

The impact of plasma on the material is carried out as a result of a number of complexes,

interrelated processes of energy, mass and charge exchange of plasma particles with the substrate. The result of such interactions are desorption of atoms and molecules from substrate, sputtering and evaporation of the particulate material, structure and phase state changes. During the plasma treatment, materials interact with active and inactive plasma particles, having high kinetic or potential energy. There are physical and chemical interaction of particles. Physical interaction of the particles is mostly by kinetic energy, which can exceed the heat by several orders of magnitude. The charged particles also have a high potential energy - the energy of recombination. In this regard, the particles upon collision with a physically solid material can spray the solid material.

The chemical reaction of the active particles is due to a high potential energy defined by the presence of unsaturated chemical bonds. The interaction of these particles with the treated material leads to the formation of chemical compounds. During plasma processing it is impossible to separate the physical and chemical interactions and specify any one process that is responsible for the effect of exposure to the plasma. Each process depends on each other. The result of processing is usually caused by simultaneous action on the material and it is determined by various factors and parameters generated by the reaction energy potential. Depending on the properties of material and low-temperature plasma parameters, the main mechanism of interaction and type of charged particles are

contributing the most significant contribution to surface modification. Selection of induction and capacitive discharges allow to compare the influence on the sorbent characteristics (grain size, the volume of pores, etc.) at different operating conditions: energy of ions and electrons, concentration, heat flux, etc. ICP discharge has a higher gas temperature compared with CCP discharge, which generate non – equilibrium plasma, i.e the electron temperature is higher than ion temperature. After the plasma exposure, we analyze particle size distribution (laser granulometry), the structure of the volume of material based on an organic compound with the definition of the characteristics of the bulk structure (high resolution X-ray microtomography), the elemental composition (X-ray fluorescence spectroscopy), the surface morphology of the particles of the sorbent (scanning electron microscopy), and characteristics of the surface wettability with the definition of potential adsorption (scanning electron microscopy in the natural environment mode ESEM) and with ASTM equivalent molecule adsorption testing with iodine. Comparison matrix characteristics before and after the plasma treatment allows to define and optimized plasma treatment process based on maximum surface activation.

Experiments and discussion of the results

Experiments were performed in the RF power range of 0.1 - 3.0 kW (discharge power of 0.1 - 1.5 kW). The pressure in the reactor of below 2.0 Torr, plasma processing gas – Argon at suitable flow rate for the reaction chamber [3]. Variation of external parameters of inductive and capacitive discharges, various treatment zones allowed to create plasma conditions in a wide range: the concentration of charged particles 10^{11} – 10^{13} cm^{-3} , the ion energy between 10 and 60 eV, the electric field strength of 500 V/m. A significant difference between electron temperature and gas temperature within the investigated pressure range allowed to get the positive effects of plasma surface modification at temperatures ranging from room temperature up to 130-170 ° C. This is an optimal processing range for sorbent's matrix. Modification of the surface of the sorbents leads to an opening of the meso space structures (Fig.1).

Activation of the surface, which will increase the sorption capacity for hydrocarbon products. Treatment of sorbent matrix type C-K at reduced pressure show significant re-distribution of average pore size: middle (meso) size pores are transferred to some large ones and the appearance of consider-

able amounts of small pore size (Fig.2). The minimum pore size is reduced to 3 μm , the maximum rose to 33 microns.

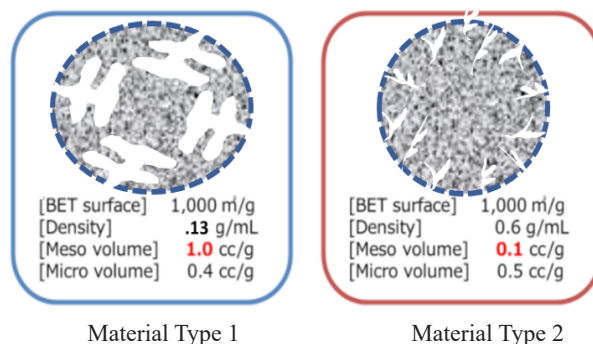


Figure 1 – Modification of the surface of the sorbents

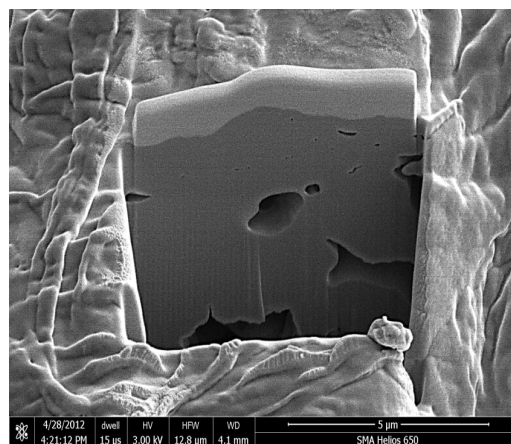


Figure 2 – The microstructure of the matrix after plasma treatment.

Gravimetric studies show increasing sorption capacity of the sorbent at 15 - 17%. This is collaborated by hydrocarbon sorbency testing, as shown in Figure 3 for commercial motor oil as based upon ASTM F726. The subject materials are 3 types, a commercial sorbent available at any retail outlet, the Type 2 as shown in Figure 1, and the Type 1 also shown in Figure 1. The Type 1 has been treated in 3 different ways, first, a crushing of the granular) to exemplify the importance of the larger spaces (like meso spaces) in the collection and holding power for hydrocarbons. Then the modified Type 1 to indicate that processing differences can create enhanced benefits; modified and max modified.

Plasma treatment of matrix based on C-Si leads to similar results for the chem-adsorption. The

difference in this case are only the parameters for the small and large pore size. The minimum pore size for the C-Si matrix after exposure to plasma is 17 microns, the maximum – 73 microns. The effectiveness of the surface activation is confirmed by the results from impregnation of the matrix [4]. At the same time coating on the activated surface or to introduce (impregnate) different substances into the matrix allow to obtain the new sorbents selective

properties. Plasma modified matrix allow to attach to the surface or into the pores of the matrix various elements, for example phosphorus (Fig. 4). Thus, it is possible to change the composition and properties of the matrix and dramatically increase the sorption properties for different and specific elements from solution (Table 1). Experiments showed that sorption capacity is about 8.1 mg/g, and specifically for Vanadium is about 4.8 mg/g.

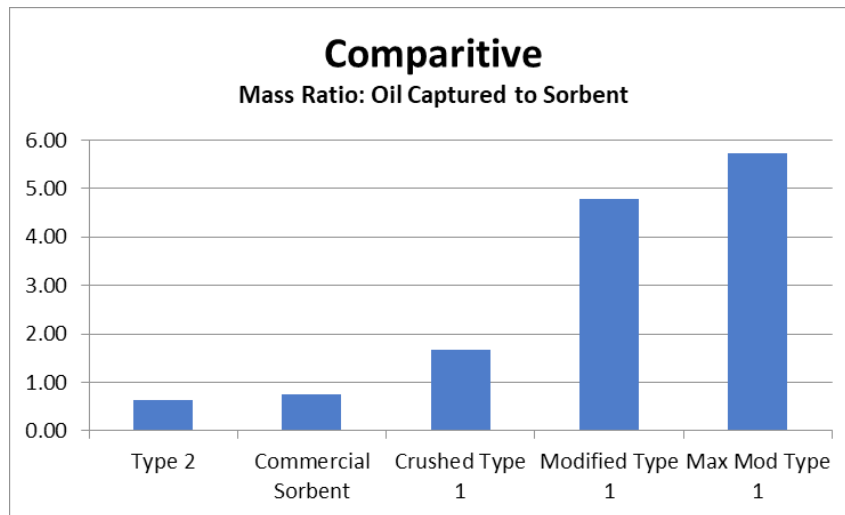
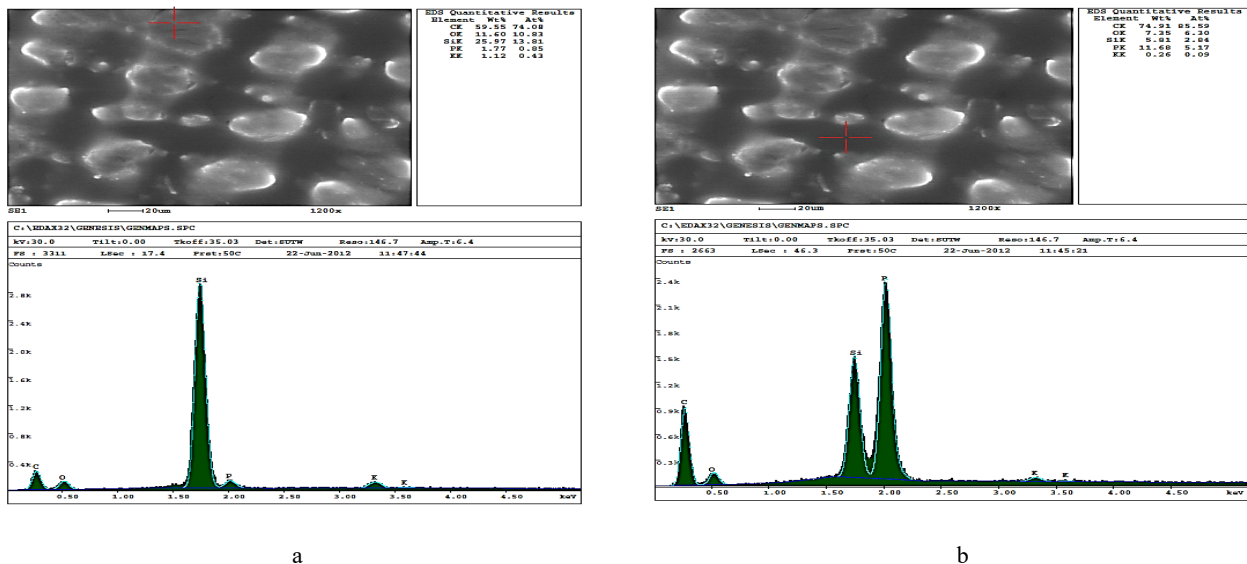


Figure 3 – Sorption capacity of the sorbent



a) the composition of the matrix before impregnation, b) the composition of the matrix after impregnation

Figure 4 – The result of impregnation of phosphorus on the surface of the treated plasma sorbent matrix:

In another implementation, impregnation of the sorbent matrix type C-Si by nano-powder (SiO_2 , particle size between 20 and 50 nm) was performed. The presence of silicon in the lattice of the matrix, adding Silicon Oxide powder to the surface of the

matrix and into pores, generate a stable structure of homogeneous Si based materials. In case of bio-sorbents, different microorganisms are used and tested. The mechanism of impregnation on the surface and in the bulk material, is almost similar.

Table 1 - Reduction of the impurities after cleaning the solution by activated sorbent

Element	Mn	Ni	W	In	Cu	Cr	Mb	Re
% Reduction	9	24	35	40	62	62	72	90
Hydrocarbon	ETB	TOL	XYI	BEN				
% Reduction	67	30	62	78				

[ETB - Ethylbenzene; TOL - Toluene ; XYI – Xylene ; BEN – Benzene]

Formation of different phases, which have their own characteristics that determine the nature of the processes. Surface phases appear in many surface phenomena. Therefore, the choice of sorbent surface as the object of the plasma exposure gives an extensive information about the processes occurring with a porous structure in the plasma.

Conclusions

1. Response of changes in the properties of porous surfaces of the body, its inter-porous and surface space from the impact of low-temperature plasma stream with specific parameters allows for the

implementation and use for physical and chemical processes utilizing the same subject material, and to develop a physical model of plasma interaction with a porous structure.

2. Modification by thermal plasma or plasma-chemical methods allows to add to the surface and into the pore space of the matrix various reagents and thus change the composition and properties of the matrix and increase the sorption properties and specific selection of different element extraction from solutions.

3. Low temperature RF plasma at pressures of 0.1 – 2.0 Torr can be successfully used to solve various environmental problems.

References

- 1 Gafarov I., Paskalov G., Ibragimov M. and Musharatskiy L. Universal Sorbent Produced from Agricultural Waste for Purification //International Symposium “Environmental and Engineering Aspects for Living”, 7-28 November 2014, Hannover. – P. 57-58.
- 2 Shaihiiev I., Galblaub O., Stepanova S. and Timirbaeva G. Oil spill cleanup of water surface by plant-based sorbents: Russian practices. //Process Safety and Environmental Protection. – 2016. – Vol. 101. – P. 88–92.
- 3 Gafarov I., Abdullin I., Ibragimov R., Paroshin V. and O.V. Zaitseva. Modification Sorbents of High-frequency Capacitive Plasma of Low Pressure//5th Central European Symposium on Plasma Chemistry. – Balatonalmadi, Hungary, 25-29 August 2013. – P.109.
- 4 Gafarov I., Paskalov G. and Abdullin I. Surface Activation of Sorbents by Using RF Plasma at Reduced Pressure/ I //9th International Conference on Plasma Assisted Technologies//ICPAT-9, 23-26 June, 2014, St.-Petersburg, Russia. – 2014. – P.54-57.

References

1. I. Gafarov, G. Paskalov, M. Ibragimov, and L.Musharatskiy, Universal Sorbent Produced from Agricultural Waste for Purification, International Symposium “Environmental and Engineering Aspects for Living”, 7-28 November 2014, Hannover, p. 57-58 (2014).
2. I. Shaihiiev, O. Galblaub, S. Stepanova, and G. Timirbaeva, Process Safety and Environmental Protection, 101, 88–92 (2016).
3. I. Gafarov, I. Abdullin, R. Ibragimov, V. Paroshin, and O.V. Zaitseva, Modification Sorbents of High-frequency Capacitive Plasma of Low Pressure, 5th Central European Symposium on Plasma Chemistry, Balatonalmadi, Hungary, 25-29 August 2013, p.109 (2013).
4. I. Gafarov, G. Paskalov, and I. Abdullin, Surface Activation of Sorbents by Using RF Plasma at Reduced Pressure, I, 9th International Conference on Plasma Assisted Technologies, ICPAT-9, 23-26 June, 2014, St.-Petersburg, Russia, pp.54-57 (2014).

Д.М. Аубакирова^{1*}, Н.К. Ердыбаева¹, В.Ф. Пичугин²

¹Восточно-Казахстанский государственный технический университет им. Д. Серикбаева,
Казахстан, г. Усть-Каменогорск,

²Томский политехнический университет, Россия, г. Томск

*e-mail: aubakirovadanagul@yandex.kz

ИССЛЕДОВАНИЕ СОСТАВА ПЛЕНОК ОКСИДОВ ТИТАНА, ОСАЖДЕННЫХ МЕТОДОМ РЕАКТИВНОГО МАГНЕТРОННОГО РАСПЫЛЕНИЯ

В работе исследованы структуры и свойства пленок оксидов титана, осажденных методом реактивного магнетронного распыления. Результаты исследования тонких пленок методами спектров ИК и комбинационного рассеяния показывают, что наличие двухфазной TiO_2 структуры и образование N–O связи при введении азота без формирования нитрида титана (TiN) могут косвенно свидетельствовать о присутствии оксидных соединений азота в составе пленки. Установлено, что структура, элементный и фазовый состав покрытий зависят от величины соотношения кислород/азот в составе реактивного газа, а также от величины отрицательного смещения на подложке. Увеличение доли азота приводит к уменьшению скорости распыления. Полученные материалы имеют структуру анатаза и рутила. Метод рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии показывает наличие азота (N) в решетке TiO_2 . В образцах, допированных азотом, в спектрах рамановского рассеяния появляется полоса при 1048 см^{-1} , связанная с присутствием азота в TiO_2 . Элементный состав исследовался также с использованием оптического эмиссионного спектрометра тлеющего разряда. Анализ молекулярных связей в покрытиях осуществлялся с использованием ИК фурье-спектроскопии. Для измерения микроспектров комбинационного рассеяния использовалась установка, разработанная в Fraunhofer IKTS-MD, состоящая из блока, содержащего инвертированный оптический микроскоп ZEISS, Axiovert и спектрометр iHR550 с охлаждаемым детектором (Horiba, Jobin Yvon Inc.). Для возбуждения колебаний использовался лазер с длиной волны $632,8 \text{ нм}$. Оптические характеристики покрытий исследовались на спектральном эллипсометрическом комплексе "Эллипс-1891 САГ" при фиксированном угле анализа 70° в интервале длин волн $\lambda = 250 - 1000 \text{ нм}$.

Ключевые слова: тонкие пленки, магнетронное распыление, оксинитриды титана, структура поверхности, реактивное осаждение

D. Aubakirova^{1*}, N. Yerdybaeva¹, V. Pichugin²

¹D.Serikbayev East Kazakhstan state technical university, Kazakhstan, Ust-Kamenogorsk,

²Tomsk polytechnic university, Russia, Tomsk

*e-mail: aubakirovadanagul@yandex.kz

Study of the composition of titanium oxide films deposited by reactive magnetron sputtering

The structure and properties of titanium oxide films deposited by reactive magnetron sputtering are studied. The results of the study of thin films using IR and Raman spectra show that the presence of a two-phase TiO_2 structure and the formation of an N–O bond when nitrogen is introduced without the formation of titanium nitride (TiN), and may also indirectly indicate the presence of nitrogen oxide compounds in the film. It was found that the structure, element and phase composition of coatings depend on the value of the oxygen / nitrogen ratio in the composition of the reactive gas, as well as on the value of the negative displacement on the substrate. An increase in the proportion of nitrogen leads to a decrease in the spray rate. The obtained materials have the structure of anatase and rutile. The x-ray photoelectron spectroscopy method shows the presence of nitrogen (N) in The TiO_2 lattice. In samples doped with nitrogen, a band appears in the Raman scattering spectra at 1048 cm^{-1} associated with the presence of nitrogen in TiO_2 . The elemental composition was also studied using an optical emission spectrometer of a glow discharge. Analysis of molecular bonding in the coatings was carried out using Fourier transform infrared spectroscopy. To measure Raman micro-spectra, a device developed at Fraunhofer IKTS-MD was used, consisting of a unit containing an inverted ZEISS optical microscope, Axiovert, and an iHR550

spectrometer with a cooled detector (Horiba, Jobin Yvon Inc.), A laser with a wavelength of 632.8 nm was used to excite the oscillations. Optical characteristics of coatings were studied on the spectral ellipsometric complex “Эллипс-1891 САГ» at a fixed angle of analysis of 70° in the range of wavelengths $\lambda = 250-1000$ nm.

Key words: thin films, magnetron sputtering, titanium oxynitrides, the structure of the surface, reactive deposition

Д.М. Аубакирова^{1*}, Н.К. Ердыбаева¹, В.Ф. Пичугин²

¹Д. Серікбаев атындағы Шығыс Қазақстан мемлекеттік техникалық университеті, Қазақстан, Өскемен қ.,

²Томск политехникалық университеті, Ресей, Томск қ.

*e-mail: aubakirovadanagul@yandex.kz

Реактивті магнетрондық шашырату әдісімен алынған титан оксиді жабынының құрамын зерттеу

Бұл жұмыста реактивті магнетрондық шашырау әдісімен алынған титан оксиді жабынының құрамы мен құрылысы зерттелген. Комбинациялық шашырау және ИК спектр әдісімен алынған жұқа жабындарды зерттеулер нәтижесі бойынша азотты қосқандағы екі фазалық TiO_2 құрылымы мен N-O байланысының түзілуін көрсетеді және жабынның құрамында азоттың оксидтік байланыстарының бар екенін растайды. Сонымен қатар, жабынның құрылымы, элементтік және фазалық құрамы реактивті газ құрамындағы оттегі/азот байланысына тәуелді екені анықталды және табаншадағы теріс ығысудың шамасына байланысты екені көрсетілді. Азоттың мөлшері ұлғайған кезде, шашырау жылдамдығы азаяды. Алынған материалдардың анатаздық және рутилдік құрылымы бар. Рентгендік фотоэлектрондық спектроскопия әдісінің талдануы TiO_2 торында азоттың бар екенін көрсетеді. Азот қосылған үлгілерде рамандық шашырау спектрінде 1048 см^{-1} кезінде TiO_2 торында азотпен байланысты сызықтар пайда болады. Элементтік құрамы жарқылдандыру разрядының оптикалық эмиссиялық спектрометр көмегімен зерттелді. Жабындағы молекулалық байланыстың талдануы ИК фурье-спектроскопия әдісімен анықталды. Комбинациялық шашыраудың микро спектрлерін өлшеу үшін ZEISS, Axiovert микроскопы және суытқыш (Horiba, Jobin Yvon Inc.) детекторы бар Fraunhofer IKTS-MD арқылы дайындалған құрылғыда жүзеге асқан. Толқындарды алу үшін 632,8 nm. болатын лазер қолданылды. Жабынның оптикалық сипаттамалары “Эллипс-1891 САГ” спектралды эллипсометрлік комплексінде жүзеге асты және оның параметрлері $\lambda = 250 - 1000$ нм. талдау бұрышы 70°.

Түйін сөздер: жұқа жабындар, магнетрондық шашырау, титанның оксинитридi, беттік құрылым, реактивті тұндыру.

Введение

Проблема биосовместимости поверхности медицинских имплантатов является одной из актуальных проблем медицинского материаловедения. Благодаря высокой биологической совместимости, весьма перспективно применение азотосодержащих соединений оксидов титана ($N-TiO_2$), которые в литературе известны как “оксинитриды титана” [1,2] осажденных методом реактивного магнетронного распыления в медицине [3]. По результатам исследований установлено, что TiO_2 обладает выраженным антибактериальным действием [4]. В качестве материала стента часто используется сталь 12X18H10T с покрытием Ti-O-N.

Физико-химические свойства (TiN_xO_y) существенно зависят от соотношения парциальных давлений газов N/O. Такое отношение концентрации в покрытиях зависит от состава реакционного газа и увеличивается с ростом содержания в нем азота. При разных соотношениях реактив-

ных газов формируются пленки с разными характеристиками. Это позволяет прогнозировать применение подобных материалов при создании новых типов биосовместимых покрытий.

В этой работе для получения оксинитридных структур используются самые разнообразные методы. Прежде всего, это химические методы. В работе [5] приводятся данные о пленках Ti-O-N, имеющих структуру анатаза, полученных золь-гель методом. FTIR спектры не показывают наличие азота в решетке, однако присутствие азота в пленке показывают данные XPS измерений. Chen *et al* [6] сообщили, что полосы ИК поглощения NO_2 ионов наблюдаются при 1618, 1318 и 750 см^{-1} . В работах [7,8] образцы Ti-O-N готовились золь-гель методом с добавлением мочевины $((NH_2)_2CO)$. Полученные материалы имеют структуру анатаза и рутила. Метод рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии показывает наличие азота (N) в решетке TiO_2 . В образцах, допированных азотом, в спектрах рамановского рассеяния появляется полоса при

1048 см^{-1} , связанная с присутствием азота в TiO_2 . Ряд работ посвящён исследованию фазовых переходов анатаз-рутил в результате внешних воздействий [9].

Особенно важным для медицинского приложения оксинитридных покрытий титана, является структура покрытий, включающие в свой состав атомы азота. Проблема положения азота в решетке покрытий подобного рода остается открытой до настоящего времени.

Целью настоящей работы является изучение структуры, химического состава наноразмерных покрытий оксидов и оксинитридов титана N-TiO_2 , осажденных в плазме аномального магнетронного разряда. Анализ результатов рамановской и инфракрасной спектроскопии проводится с целью определения связей в структуре покрытий, обусловленных присутствием ионов азота.

Материалы и методы эксперимента

Для напыления покрытий использовалась установка среднечастотного магнетронного напыления «УВН-200МИ» с плоским магнетронным источником. Пленки на основе азотосодержащих оксидов титана (N-TiO_2) наносились на подложки из нержавеющей стали 12X18H10T, монокристаллы KBr и пластины кремния (100). Режимы осаждения покрытий были следующими: распыляемый материал катода – Ti, мощность 0.8 кВт, ток 3 А. Плазмообразующим газом служила смесь азота и кислорода. Давление для всех режимов напыления составляло 10^{-1} Па. Соотношение массового расхода азота и кислорода (N_2/O_2) в составе рабочего газа поддерживалось на уровне: (N_2/O_2) = 0 (№1), (N_2/O_2) = 1/1 (№2), (N_2/O_2) = 3/1 (№3). Все образцы напылялись в режиме без электрического смещения. В процессе осаждения подложка нагревается за счет воздействия плазмы до $(130 \pm 5)^\circ\text{C}$.

Элементный состав исследовался, также, с использованием оптического эмиссионного спектрометра тлеющего разряда GD PROFILER (Jobin Yvon). Анализ молекулярных связей в покрытиях осуществлялся с использованием ИК фурье-спектроскопии (Thermo Nicolet 5700) в диапазоне $(400 - 4000) \text{см}^{-1}$. Для измерения микроспектров комбинационного рассеяния использовалась установка, разработанная в Fraunhofer IKTS-MD, состоящая из блока, содержащего инвертированный оптический микроскоп ZEISS, Axiovert и спектрометр iHR550 с охлаждаемым детектором (Horiba, Jobin Yvon Inc.), Для воз-

буждения колебаний использовался лазер с длиной волны 632,8 нм.

Оптические характеристики покрытий исследовались на спектральном эллипсометрическом комплексе «Эллипс-1891 САГ» при фиксированном угле анализа 70° в интервале длин волн $\lambda = 250 - 1000$ нм.

Результаты и их обсуждение

Молекулярный состав осажденных покрытий исследовался методами ИК спектроскопии и комбинационного (рамановского) рассеяния, которые широко используются для анализа молекулярного состава материалов на основе оксидов титана TiO_2 [10].

Инфракрасное поглощение. Типичные инфракрасные (ИК) спектры поглощения покрытий представлен на рисунке 1.

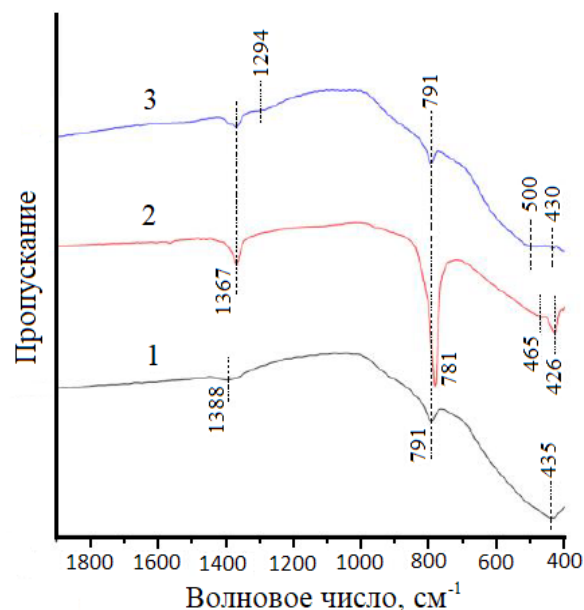


Рисунок 1 – ИК спектры плёнок, осажденных при массовом соотношении N_2/O_2 : 0 (1), 1 (2) и 3 (3)

В ИК – спектрах исследуемых образцов наблюдаются полосы, соответствующие колебаниям решётки TiO_2 , в области $(1367-1388) \text{см}^{-1}$ [11]. Пики, расположенные в диапазоне волновых чисел $(781-791) \text{см}^{-1}$ (рисунок 1), соответствуют колебаниям Ti–O связи [12]. Поглощение, характерное для валентных колебаний Ti–O и Ti–O–Ti в рутиле наблюдаются в области $(426-500) \text{см}^{-1}$ [13]. Появление слабого пика при 1294см^{-1} свидетельствует об образовании N–O связи [14].

Таким образом, данные, полученные методами ИК спектроскопии, демонстрируют наличие двухфазной TiO_2 структуры и образование N–O связи при введении азота без формирования нитрида титана (TiN), что согласуется с данными РФА и РФЭС [15], а также могут косвенно свидетельствовать о присутствии оксидных соединений азота в составе пленки.

Рамановское рассеяние. Данные, касающиеся спектров КР оксидных покрытий титана, осажденных методом РМР весьма ограничены.

Типичные спектры КР света пленками TiO_2 и Ti–O–N представлены на рисунках 2 и 3 соответственно.

Как видно из рисунков 2 и 3 в спектрах присутствуют две группы пиков: группа пиков в диапазоне 200 – 700 cm^{-1} (Таблица 1) и группа широких перекрывающихся пиков, в диапазоне (700 – 1600) cm^{-1} (Таблица 2).

Диоксид титана имеет три раман-активные модификации: анатаз, рутил и брукит. В КР спектрах анатаза имеется 6 мод: $1A_{1g}$ (515 cm^{-1}), $2B_{1g}$ (399 и 519 cm^{-1}) и $3E_g$ (144, 197 и 639 cm^{-1}). [16]. У рутила в рамановском спектре активны 4

моды: A_{1g} (612 cm^{-1}), E_g (447 cm^{-1}), B_{2g} (826 cm^{-1}) и B_{1g} (143 cm^{-1}).

В таблице 1 представлены линии, расположенные в диапазоне 200–700 cm^{-1} характерные для TiO_2 – анатаза (415, 492-496 cm^{-1}), рутила (247-253, 447-459, 607-616 cm^{-1}), аморфного TiO_2 (330-347 cm^{-1}), а линии 278-286 cm^{-1} могут быть идентифицированы как Ti_2O_3 [17]. В работе [18] показано, что в спектрах КР оксинитридных покрытий присутствуют линии, характерные для анатаза: E_{g1} (139.2 cm^{-1}), E_{g2} (190 cm^{-1}), B_{1g} (398 cm^{-1}), ($A_{1g} + B_{1g}$) (516 cm^{-1}) и E_{g3} (640 cm^{-1}). Линии E_{g1} , E_{g2} , B_{1g} смещены в красную область. Все исследованные образцы имеют спектр типичный для образцов объемного анатаза [19]: основной максимум при 144 cm^{-1} (E_g , O–Ti–O (изгибная мода, bending mode) и другие при 198 cm^{-1} (B_{1g}/A_{1g}), 398 cm^{-1} (B_{1g}), и 640 cm^{-1} (E_g , Ti–O продольная мода, bond stretching mode). Красного сдвига линии E_g при 640 cm^{-1} (валентное колебание) в сравнении с ее положением в образцах чистого TiO_2 не наблюдалось. Полученные данные показывают, что атомы азота не встраиваются в междоузлия решетки TiO_2 и не оказывают влияние на длину Ti–O связей.

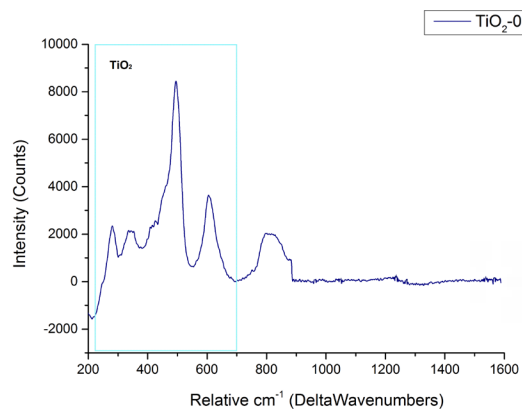


Рисунок 2 – Рамановский спектр TiO_2 покрытия №1 ($N_2/O_2 = 0$)

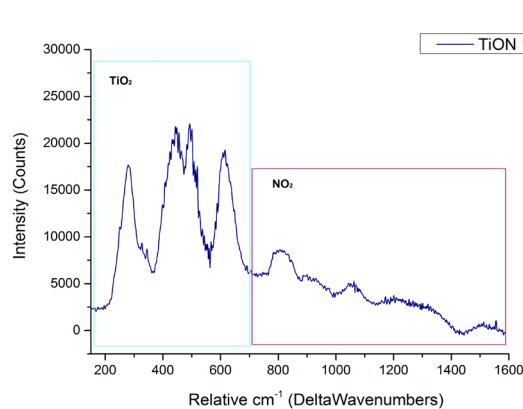


Рисунок 3 – Рамановский спектр покрытия №2 ($N_2/O_2 = 1/1$)

Таблица 1 – Линии рамановского рассеяния покрытий в диапазоне 200 – 700 cm^{-1}

Образец	Положение линий рамановского рассеяния, cm^{-1}						
	R	Ti_2O_3	аморфный TiO_2	A	R	A	R
TiO_2 -0	247	282	342	415	447	495	607
(1/1) №2		280	346		442	496	616
(3/1) №3		282	345		450		616

Первая группа пиков (200 – 700 см⁻¹) присутствует в спектрах КР всех полученных пленок, в то время, как вторая группа пиков присутствует только в покрытиях, осажденных в атмосфере, содержащей кислород (O₂) и азот (N₂). В рамановском спектре проявляется 6 линий анатаза: A_{1g}, 2 B_{1g} и 3 E_g. Эти моды являются характерными для обоих образцов. В рамановском спектре активны 4 моды рутила: A_{1g}, E_g, B_{2g} и B_{1g}. Максимум около 440 см⁻¹ практически не перекрывается с линиями анатаза и его можно использовать для определения соотношения фаз. Линия при (826 см⁻¹ B_{2g}) 815 см⁻¹ приписывается рутилу. В спектрах КР всех типов покрытий в диапазоне (200 – 700) см⁻¹ присутствуют пики, соответствующие как анатазу, так и рутилу.

Основные линии КР, отвечающие различным формам оксида азота, наблюдаются в диапазоне 700 – 1700 см⁻¹ [20]. Интенсивные линии при 770 и 1050 см⁻¹, связаны с колебаниями

свободного или физически адсорбированного NO₂ (или NO₃⁻). Мода при 1050 см⁻¹ исчезает при нагревании выше 100°C, что согласуется с литературными данными [5-10]. Нитрат – ион может быть мостиковым (атомы O присоединяются к различным атомам металла) или бидентатным (атомы O присоединяются к одному атому металла). Линию при 1287 см⁻¹ обычно приписывают валентным колебаниям нитрит – аниона в виде бидентатного лиганда. Спектр нитрат – иона состоит из трех мод: ν₁, A₁ (1050 см⁻¹), слабоинтенсивной ν₃, E' (1380 см⁻¹ и ν₄ колебания NO₃⁻ иона, E' при 720 см⁻¹). В таблице 2 представлены линии спектров КР в области 700 – 1600 см⁻¹.

Данные, представленные в таблице 2, показывают, что в спектрах КР Ti-O-N покрытий присутствуют практически все линии, характерные для нитрат-ионов, т.е. ионы азота находятся в покрытии в оксидной форме.

Таблица 2 – Линии рамановского рассеяния в диапазоне (700 – 1600) см⁻¹.

Образец	Положение линий рамановского рассеяния, см ⁻¹							
	ν ₄ NO ₃	R	NO ₃ линии 976	ν ₁ NO ₃		NO	ν ₃ NO ₃	бидентатные NO ₃
TiO ₂ -0		810						
(1/1) №2		805	930	1055	1215	1280	1342	1515
(3/1) №3	730	810	940	1045	1220			

Заключение

Таким образом, Данные ИК и рамановской спектроскопии демонстрируют наличие двухфазной (анатаз и рутил) TiO₂ структуры и образова-

ние N–O связей, в составе пленки, при введении азота. Фаза нитрида титана (TiN) в составе пленки не наблюдается. В спектрах КР всех типов покрытий в определенных диапазонах присутствуют пики, соответствующие как анатазу, так и рутилу.

Литература

- 1 Chappé J., Martin N. Gradual Evolution of the Properties in Titanium Oxynitride Thin Films Process, Properties and Applications. Ed. by F. Vaz, N. Martin & M. Fenker. – Bentham Science Publishers, 2013. – 346 p.
- 2 Subramanian B., Muraleedharan C. A comparative study of titanium nitride (TiN), titanium oxy nitride (TiON) and titanium aluminum nitride (TiAlN), as surface coatings for bio implants. / Surface & Coatings Technology. – 2011. – Vol. 205. – P.5014-5020.
- 3 Trenzcek-Zajaca A. Structural and electrical properties of magnetron sputtered Ti(ON) thin films: The case of TiN doped in situ with oxygen // Journal of Power Sources. – 2009. – Vol. 194. – P.93-103.
- 4 Wang Y. Synthesis and characterization of amorphous TiO₂ with wormhole-like framework mesostructure // J. Non. Cryst. Solids. – 2003. – Vol. 319. – P.109-116.
- 5 Cordeiro D. Infrared spectroscopy of titania sol-gel coatings on 316L stainless steel // Mater. Sci. Appl. – 2011. – Vol.2. – P.1375-1382.
- 6 Mahalingam S., Edirisinghe M. Novel preparation of nitrogen-doped titanium dioxide films // J. Phys. D: Appl. Phys. – 2008. – Vol. 41. – P.215406.
- 7 Gaintantzopoulou M. Micro-Raman spectroscopic analysis of TiO₂ phases on the root surfaces of commercial dental implants // Dental materials. – 2014. – Vol.30. – P.148-155.

- 8 Sergent N., Epifani M. Interactions of nanocrystalline tin oxide powder with NO₂ //A Raman spectroscopic study. – 2007. – V.126. – P.1-5.
- 9 Abello L., Bochu B. Structural Characterization of Nanocrystalline SnO₂ by X-Ray and Raman Spectroscopy. //J. Sol.st. Chem. – 1998. – Vol.135. – P.78-85.
- 10 Anupam K., Shiv K., Tayro E., David E. Detection of Chemicals with Standoff Raman Spectroscopy //Spectroscopy. – 2011. – Vol.15. – P.105-112.
- 11 Yu Y. et al. NO adsorption and diffusion on hydroxylated rutile TiO₂ (110) // Phys. Chem. Chem. Phys. – 2015. – Vol. 40. – P.26594-26598.
- 12 Cervantes B. Cytotoxicity evaluation of anatase and rutile TiO₂ thin films on CHO-K1 cells in vitro// Materials. – 2016. – Vol. 8. – P. 1–11.
- 13 Pustovalova A., Pichugin V., Ivanova N., Bruns M. Structural features of N-containing titanium dioxide thin films deposited by magnetron sputtering.// Thin Solid Films. – 2017. –Vol. 627. – P.9-16.
- 14 Ma H.L., Yang J.Y., Dai Y., Zhang Y.B., Lu B., Ma G.H. Raman study of phase transformation of TiO₂ rutile single crystal irradiated by infrared femtosecond laser //Applied Surface Science. – 2017. – Vol. 253. – P.7497-7500.
- 15 Пичугин В.Ф., Пустовалова А.А., Конищев М.Е., Аубакирова Д.М.. Структурные особенности и физико-химические свойства азотосодержащих пленок диоксида титана, выращенных методом реактивного магнетронного распыления //14-я Междун. конф. «Пленки и покрытия-2019» Санкт-Петербург. – 2019. – P.507-510.
- 16 Пичугин В.Ф., Плотноков С.В., Ердываева Н.К., Аубакирова Д.М. Структура поверхности, фазовый и химический состав азотосодержащих пленок оксидов титана, осажденных методом реактивного магнетронного распыления //Вестник ВКГУ. – 2019. – №.4. – P.130-133.
- 17 Пустовалова А.А., Конищев М.Е., Чжилий Сунь. Анализ микроструктуры пленок на основе оксинитридов титана, осажденных методом реактивного магнетронного распыления //Междун. конф. «Перспективы развития фундаментальных наук», Томск. – 2017. – P.423-425.
- 18 Гребнева И.А., Конищев М.Е., Быкова Ю.В., М.Е., Исследование физических свойств гемосовместимых покрытий на основе оксидов и оксинитридов титана. //Междун. конф. «Перспективы развития фундаментальных наук», Томск. – 2015. – P.38-40.
- 19 Юрьев Ю.Н., Михневич К.С., Кривобоков В.П., Киселева Д.В. Свойства пленок нитрида титана, полученных методом реактивного магнетронного распыления //Известия Самарского научного центра РАН. – 2016. – Vol.16, №4(3). – P.672-676.
- 20 Вилья Н., Голосов Д., Нгуен Т. Формирование пленок оксида титана методом реактивного магнетронного распыления //Доклады БГУИР. – 2019. – №5(23). – P.87-93.

References

- 1 J. Chappé, N. Martin, Gradual Evolution of the Properties in Titanium Oxynitride Thin Films Process, Properties and Applications. Ed. by F. Vaz, N. Martin & M. Fenker, (Bentham Science Publishers, 2013), 346 p.
- 2 B. Subramanian, C. Muraleedharan. Surface & Coatings Technology, 205, 5014–5020 (2011).
- 3 A. Trenczek-Zajaca et. al., Journal of Power Sources, 194, 93-103 (2009)
- 4 Y. Wang, J. Non. Cryst. Solids, 2, 109-116 (2003).
- 5 D. Cordeiro, et al., Mater. Sci. Appl., 2, 1375-1382 (2011).
- 6 S. Mahalingam and M.J. Edirisinghe, J. Phys. D: Appl. Phys., 41, 215406 (2008).
- 7 M. Gaintantzopoulou, Dental materials, 30(8), 148-155 (2014).
- 8 N. Sergent, M. Epifani, et.al., A Raman spectroscopic study, 126, 1-5 (2007).
- 9 L. Abello, B. Bochu, et.al., J. Sol.st. Chem., 135, 78-85 (1998).
- 10 Anupam K. Misra, Shiv K. Sharma, Tayro E. Acosta, and David E. Bates, Spectroscopy, 15, 105-112 (2011).
- 11 Y. Yu, et al, Phys. Chem. Chem. Phys., 40, 26594-26598 (2015)
- 12 B. Cervantes, Materials, 8, 1-11 (2016).
- 13 A. Pustovalova, V. Pichugin, N. Ivanova, and M. Bruns, Thin Solid Films, 627, 9-16. (2017).
- 14 H.L. Ma, J.Y. Yang, Y. Dai, Y.B. Zhang, B. Lu, and G.H. Ma, Applied Surface Science, 253 7497-7500 (2017).
- 15 V. Pichugin, A. Pustovalova, M.E. Konishev, D.M. Aubakirova, Strukturnyye osobennosti i fiziko-khimicheskiye svoystva azotosoderzhashchikh plenok dioksida titana, vyrashchennykh metodom reaktivnogo magnetronnogo raspyleniya, 14-ya Mezhdunarodnaya konferentsiya «Plenki i pokrytiya-2019» Sankt-Peterburg, 507-510 (2019). (in Russ)
- 16 V.F. Pichugin, S.V. Plotnikov, N.K. Yerdybayeva, D.M. Aubakirova, Vestnik VKGTU, 4, 130-133 (2019) (in Russ)
- 17 A.A. Pustovalova, M.Ye. Konishchev, Chzhiley Sun', Analiz mikrostruktury plenok na osnove oksinitridov titana, osazhdennykh metodom reaktivnogo magnetronnogo raspyleniya, Mezhdunarodnaya konferentsiya «Perspektivy razvitiya fundamental'nykh nauk», Tomsk, 423-425 (2017). (in Russ)
- 18 I.A. Grebneva, M.Ye. Konishchev, Yu.V. Bykova. M.Ye., Issledovaniye fizicheskikh svoystv gemosovmestimyykh pokrytiy na osnove oksidov i oksinitridov titana, Mezhdunarodnaya konferentsiya «Perspektivy razvitiya fundamental'nykh nauk», Tomsk, 38-40 (2015) (in Russ)
- 19 Yu.N. Yur'yev, K.S. Mikhnevich, V.P. Krivobokov, D.V. Kiseleva, Izvestiya Samarskogo nauchnogo tsentra rossiyskoy akademiyey nauk, 16, №4(3), 672-676 (2016). (in Russ)
- 20 N. Vil'ya, D. Golosov, T. Nguyen, Doklady BGUIR, 5(23), 87-93 (2019). (in Russ).

С. Опахай*, К.А. Кутербеков, С.А. Нұркенов

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Қазақстан, Нұр-Сұлтан қ.,

*e-mail: serikjan_0707@mail.ru

МЕТАЛЛ ТІРЕУІШІ НЕГІЗІНДЕГІ ҚАТТЫ ОКСИДТІ ОТЫН ЭЛЕМЕНТТЕРІ ҮШІН NiAl ИНТЕРМЕТАЛДЫҚ ҚОСЫЛЫСЫНЫҢ СИНТЕЗІ

Кеуекті металдарды қолданудың перспективті бағыттарының бірі металл тіреуіші негізіндегі қатты оксидті отын элементтері болып табылады. Қазіргі таңда металл тіреуішті құрылым тіреуіш міндетін керамикалық электрод немесе электролит атқаратын қатты оксидті отын элементтерімен салыстырғанда жылдам іске қосылу, зор сенімділік, механикалық тұрақтылық, термоциклденуге төзімділігіне байланысты үлкен қызығушылық тудыруда. Сонымен қатар, отын элементтерінің құнын кеуекті металл пластинасын тірек қызметін орындайтын құрылымға көшіру арқылы азайтуға болады, мұнда электролиттер мен электродтар жұқа пленка түрінде жабылады. Көп жағдайда тот баспайтын болаттар қатты оксидті отын элементтерінің металл тіреуіштерін дайындау үшін қолданылады, өйткені олардың жылулық кеңею коэффициенттері отын ұяшықтарының басқа компоненттерінікіне жақын болады және тотығу процесіне жоғары төзімділік көрсетеді. Алайда, жоғары температурада Fe, Cr металды негіз бен анодты Ni арасында реакция жүреді, бұл анодтың каталитикалық белсенділігінің төмендеуіне әкеледі. Осы мәселені шешудің тиімді жолы Ni немесе NiAl интерметаллидті қосылысы негізіндегі металл тіреуіштерін дайындау болып табылады. Сондықтан аталған шолу мақалада әлемдік ғалымдардың NiAl интерметалдық қосылыстарды синтездеу ерекшеліктері мен әдістері, синтез термодинамикасы, сипаттамалары, процесс параметрлері және реакцияның ерекшеліктері туралы жазған еңбектерін егжей-тегжейлі талқылаймыз.

Түйін сөздер: қатты оксидті отын элементтері (ҚООЭ), металл тіреуіші, интерметалды қосылыстар, жылулық жарылыс, адиабатикалық температура.

S. Opakhai*, K.A. Kuterbekov, S.A. Nurkenov

L.N. Gumilyov Eurasian National University, Kazakhstan, Nur-Sultan,

*e-mail: serikjan_0707@mail.ru

Synthesis of NiAl intermetallic compound as a metal support for solid oxide fuel cells

One of the promising areas of application of porous metals are solid oxide fuel cells on a metal base. Structures with a metal base are of great interest due to the possibility of quick start, greater reliability, mechanical stability, resistance to thermal cycling in comparison with solid oxide fuel cells in which ceramic electrodes or electrolyte are used as the supporting base. In addition, the cost of fuel cells can be reduced by moving to a design in which a porous metal plate performs the supporting function, and the electrolyte and electrodes are deposited in the form of thin films. In most cases, stainless steel is used for the manufacture of supporting metal substrates for SOFCs because they have a coefficient of thermal expansion (CTE) close to that of other components of the fuel cell and high oxidation resistance. However, at high temperatures, a reaction occurs between Fe, Cr from the metal base and Ni from the anode, which leads to a decrease in the catalytic activity of the latter. To solve this problem, the interaction of Cr with Ni is the manufacture of metal bases based on Ni, Ni-Al intermetallic compounds. In this review, we discuss in detail the work of world scientists on the synthesis of Ni-Al intermetallic compounds, especially methods, synthesis thermodynamics, characteristics, process parameters, and reaction features.

Key words: solid oxide fuel cells (SOFC), metal substrate, intermetallic compounds, thermal explosion, adiabatic temperature.

С. Опахай*, К.А. Кутербеков, С.А. Нуркенов

Евразийский национальный университет имени Л.Н Гумилева, Казахстан, г. Нур-Султан,

*e-mail: serikjan_0707@mail.ru

**Синтез NiAl интерметаллического соединения
в качестве металлической основы
для твердооксидных топливных элементов**

Одной из перспективных областей применения пористых металлов являются твердооксидные топливные элементы на металлической несущей основе. Конструкции с металлической основой представляют повышенный интерес, благодаря возможности быстрого запуска, большей надежности, механической стабильности, стойкости к термоциклированию по сравнению с твердооксидными топливными элементами у которых в качестве несущей основы используются керамические электроды или электролит. Кроме того, стоимость топливных элементов может быть снижена при переходе к конструкции, в которой несущую функцию выполняет пористая металлическая пластина, а электролит и электроды нанесены в виде тонких пленок. В большинстве случаев для изготовления несущих металлических основ твердооксидных топливных элементов используют нержавеющие стали вследствие того, что они имеют коэффициент термического расширения (КТР), близкий к КТР других компонентов топливного элемента, и высокую стойкость к окислению. Однако при высоких температурах происходит реакция между Fe, Cr из металлической основы и Ni из анода, что приводит к снижению каталитической активности последнего. Для решения этой проблемы взаимодействие Cr с Ni является изготовление металлических основ на базе Ni, интерметаллических соединений Ni-Al. В настоящем обзоре мы подробно обсуждаем работы мировых ученых по синтезу интерметаллических соединений Ni-Al, особенно методы, термодинамика синтеза, характеристики, параметры процесса и особенности реакции.

Ключевые слова: твердооксидные топливные элементы (ТОТЭ), металлическая подложка, интерметаллические соединения, тепловой взрыв, адиабатическая температура.

Кіріспе

Қатты оксидті отын элементтерінің металл тіреуішіндегі кеуекті металл қорытпасы анодқа, электролитке және катодқа механикалық тіреу көрсетеді, сонымен қатар электрлік байланыстырушы қызметін де атқарады. Бұл тіреуіштің артықшылығы – механикалық беріктігі, жылу соққыларына төзімділіктің жақсаруы, өзіндік құнының төмен болуы және жинау үшін металды біріктірудің дәстүрлі әдістерін (мысалы, лазерлік дәнекерлеу) қолдану мүмкіндігі болып табылады [1]. Әдетте металл тіреуіші – бұл кеуектілігі 35-45% және кеуек мөлшері 100 мкм дейін металл ұнтақтарын синтездеу арқылы жасалған кеуекті өткізгіш материал болады [2].

Металл тіреуіші негізіндегі қатты оксидті отын элементтері Ni, FeNi, NiCrAlY және тот баспайтын болаттан жасалған ферритті металдарды қоса алғанда әртүрлі металл құрамы бар субстратта дайындалды [1]. Көптеген құрастырушылар құрамында 10,5-26% Cr бар тот баспайтын болатты құнының төмендігі, жемірілуге төзімділігі және жылулық кеңею коэффициенттері қатты электролит материалдарына жақын болғандықтан металл тіреуіші ретінде ұсынады [2,3]. Ферритті тот баспайтын болаттағы хром мөлшері 10,5% асқан кезде, ме-

талл тіреуішті оның әрі тотығуынан қорғау үшін жұқа және өткізгіш хром қабыршақтары пайда болады. Бірақ Cr құрамы 26% жоғары болған кезде сынғыш сигма фазасының пайда болуы мүмкін. Ферритті тот баспайтын болаттың бірнеше жақсы қасиеттері бар, алайда Fe және Cr сияқты улы катиондардың каталитикалық қабатқа тасымалдануы анодтың каталитикалық қызметін төмендетеді [4].

Интерметалдық қосылыстар – екі немесе одан да көп металл немесе жартылай металды элементтерден тұратын, құрылымы реттелген және жақсы үйлескен стехиометриядан тұратын қатты фазалар ретінде анықталады [5-6]. Олар жоғары балқу температурасына ие және қоршаған орта температурасында әдетте сынғыш болады. Интерметалдық қосылыстар олардың аралас (металл және ковалентті) байланыстары мен күшті ішкі тәртібі арқасында қажетті магнитті [7], өткізгіштігі жоғары [8] және ерекше химиялық қасиеттерін [9] көрсете алады. Интерметалдық қосылыстардың кейбір маңызды конструкциялық қосымшалары құрылымдық тұрақтылыққа және олардың икемділігінің жақсаруына байланысты қолданысқа енгізілді. Дәстүрлі кеуекті бейорганикалық материал әдетте екі санатқа жіктеледі: кеуекті керамика [10] және кеуекті металдар [11]. Жақында

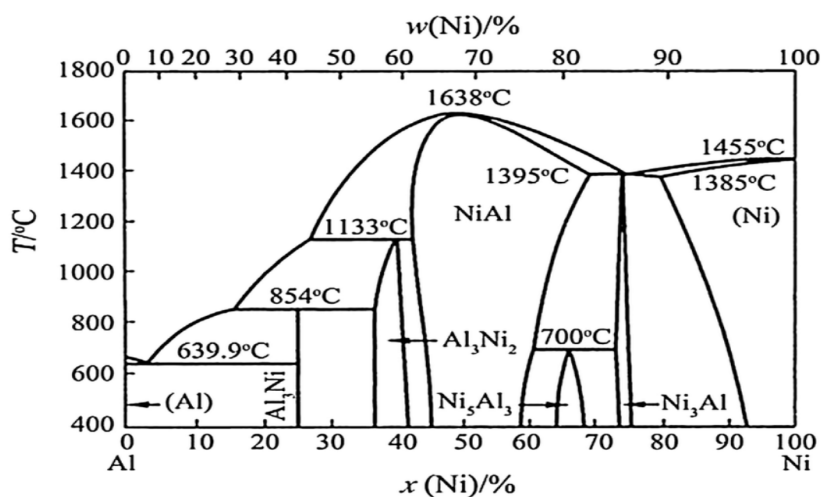
ғалымдар кеуекті материалдарды жасау технологиясына сүйеніп, металдар мен керамиканың үйлесімділігін ескере отырып әртүрлі заманауи маңызды материалдар ұсынды [12,13,14]. Атомды диффузия арқылы кеуекті интерметалдық қосылыстардың кеуек құрылымы қатаң заңдылықпен және өндірістік параметрлермен жақсы басқарылатындығын көрсетеді [13].

Кеуекті интерметалдық қосылыстарды жасау және пайдалану – бұл интерметалдық қосылыстардың материалы мен олардың сынғыштығына қарсы тұруға мүмкіндігін тудырады [12,13,14]. Қазіргі таңда кеуекті интерметалдық қосылыстар олардың құрылымдық және функционалды материал ретінде жылу соққыларына тамаша төзімділігі, бөлмедегі және жоғары температурадағы жақсы механикалық қасиеттері, жоғары құрылымдық тұрақтылық, жақсы жылу өткізгіштік, жемірілуге деген ерекше төзімділігі, жұмыс қабілеттілігі мен электр өткізгіштігі сияқты металдармен бірге керамиканың да артықшылықтарын біріктіретін көптеген қасиеттеріне негізделіп үлкен қызығушылық тудыруда [15].

NiAl интерметалдық қосылыстары ҚООЭ металл тіреуіші ретінде қолдануға үлкен мүмкіндіктер тудырады [16,17]. Өйткені ол жоғары механикалық беріктік, төмен тығыздық (5.86 г/см^3), жоғары балқу температурасы (1638°C), Янг модулінің жоғары деңгейі (294 ГПа), тотығуға төзімділігі (1000°C) сияқты маңызды құрылымдық қасиеттер жиынтығына ие болумен

қатар құнының төмендігі, қарапайым өндіру технологиясына ие болып табылады [18]. NiAl интерметалдық қосылыстары жоғары температурада Ni негізіндегі суперқорытпаларға потенциалды кандидат ретінде зерттелді, өйткені олардың коррозияға және тотығуға жоғары тұрақтылығы жоғары болады [19,20]. Металл тіреуіші негізіндегі қатты оксидті отын элементтері үшін кеуекті NiAl интерметалдық [21,22] қосылыстарының тағы бір тамаша қасиеттерінің бірі механикалық беріктігімен қатар химиялық және электрохимиялық әсерлерге төзімділігі болып табылады.

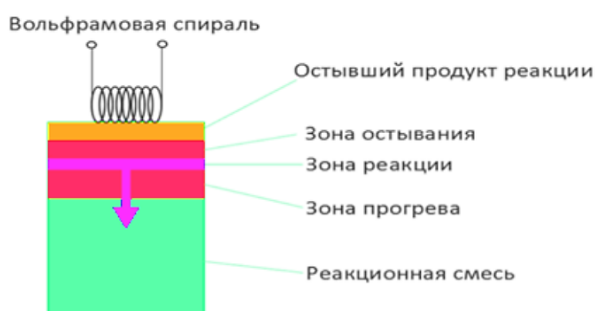
NiAl бинарлы фазалық диаграммасында бес түрлі интерметалдық қосылыс (Al_3Ni , Al_3Ni_2 , Al_3Ni_5 , NiAl, Ni_3Al) көрсетілген (сур. 1). Осы қосылыстардың ішінен NiAl әлі күнге дейін ғалымдардың ерекше қызығушылығын тудыруда, себебі ол жоғарыда айтқандай қатты оксидті отын элементтерінің металл тіреуіші ретінде тамаша кандидат болумен қатар бинарлы диаграммадан көріп тұрғанымыздай ең жоғары балқу температурасы, салыстырмалы түрде төмен тығыздығы, тамаша беріктігі және жоғары температурада коррозия мен тотығуға төзімділігі сияқты қасиеттерімен ерекшеленіп тұр. Сондықтан осы шолу мақалада NiAl интерметалдық қосылыстарын алу, синтездеу әдістері, процестің термодинамикасы мен реакциялардың жүру заңдылықтары жөніндегі әлемдік ғалымдардың еңбектерін егжей-тегжейлі талқылаймыз.



1-сурет – NiAl бинарлы фазалық диаграммасы

NiAl синтездеу әдістері

Бүгінгі таңда NiAl интерметалдық қосылыстарын синтездеуде екі әдіс қолданылады: өздігінен жүретін жоғары температуралы синтез (ӨЖЖТС) және жылулық жарылыс әдісі (2-сурет). ӨЖЖТС әдісінің мәні мынада: бастапқы реагенттер қоспасының жұқа қабатындағы өзара әрекеттесу реакциясы жергілікті ауданда басталғаннан кейін жану реакциясы басталатын ыстық өнімдер есебінен жылытылатын бастапқы материалдарға жылу беру салдарынан бүкіл жүйеде өздігінен таралады. Мұнда жану процесі жүреді, онда өнімдердің пайда болуы жанудың себебі мен салдары болып табылады. Аталған синтез әдісі оны бейорганикалық қосылыстарды өндірудің қолданыстағы әдістерінен ерекшелетін бірқатар ерекшеліктерге ие болады. Оларға жоғары температура мен қысқа синтездеу уақыты, процесі басқару мүмкіндігі, энергияның төмен шығыны және жабдықтың қарапайымдылығы, өнімнің көп мөлшері мен оның тазалығы сияқты синтездеу мүмкіндігі т.б. кіреді [23-24].



2-сурет – Өздігінен жүретін жоғары температуралы синтез (<https://pikabu.ru/>)

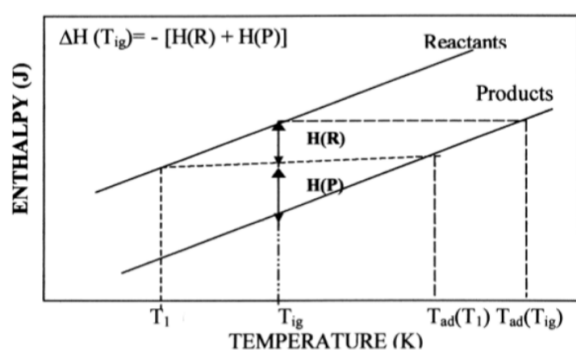
Жылулық жарылыс режимінде синтездеу кезінде реакциялық жүйенің бүкіл көлеміндегі температураның жоғарылауы уақыт өте келе оның өздігінен қызуына әкеледі [25]. Жылулық жарылыс режимінде ӨЖЖТС жасау үшін реакцияға қабілетті зат (көбіне гетерогенді ұнтақтар қоспасы) пешке орналастырылады, ол біркелкі қызады, яғни бүкіл көлем бойынша бірдей температураны алады. Егер осындай біркелкі жылыту кезінде химиялық реакцияның жылу бөлінуі байқалса, онда заттардың температурасы одан әрі көтеріледі (зат өздігінен қызады). Реакция жылдамдығының температураға экспоненциалды тәуелділігіне байланысты

зат көлеміндегі температураның жоғарылауы үдемелі өздігінен жүреді және температураның күрт секірісімен аяқталады, сондықтан бұл режим «өздігінен жану» немесе «жылулық жарылыс» деп аталады. Заттың бүкіл көлемінде бір мезгілде өзін-өзі жылыту салдарынан болған жылулық жарылыс кезінде заттың жоғары температурасы өнімнің синтезімен аяқталады [26].

NiAl синтезінің термодинамикасы

Интерметалдық қосылыстарды синтездеу реакциясы экзотермиялық болып табылады [27]. Экзотермиялық түрленудің екі негізгі формасы бар: жылу жарылыс және қабаттық жану режимі [28]. Жылулық жарылыс режимі критикалық жағдайларға жеткенде реакция жүйесінің бүкіл көлеміндегі реакцияның жүруімен сипатталады. Жану режимінде химиялық реакция жылуы оның жергілікті аймағынан кейін тар аймақ түріне өздігінен қозғалады. Қазіргі таңда карбидтер, боридтер, нитридтер және басқалары сияқты бейорганикалық қосылыстардың түзілу процесерін термодинамикалық талдауда көптеген нәтижелерге қарамастан, интерметалдық қосылыстардың қалыптасу процесерін термодинамикалық талдау туралы деректер іс жүзінде жоқ. Кейбір қосылыстардың тек бағалау деректері ғана бар. Бұл аталған қосылыстардың анықтамалық әдебиетте тек жылулық түзілу мәндері ғана келтірілгенін, ал энтропия, жылусыйымдылық, балқу жылуы сияқты мәндері жоқ екенін көрсетеді.

3-суретте ӨЖЖТС және жылулық жарылыс кезінде энергияның берілуі келтірілген. Егер бөлме температурасында реакция өздігінен жүрмесе, тұтану мүмкін болмас бұрын затты жоғары температураға дейін қыздыру керек (мысалы, T_1 температурасына дейін). Егер сынама алдын-ала қыздырылса, $H(R)$ жылу қабілетін тұтату температурасына дейін жоғарылату қажет (сәйкесінше T_1 бастапқы жоғарырақ температурасында), бұл ӨЖЖТС реакциясына ықпал етеді. Алдын ала қыздыру температурасынан басқа, тұтану температурасына (T_{ig}) жетпес бұрын көрші қабаттан жылу алынып тасталса, реакция өзін-өзі қамтамасыз ете алмайды. Бұл жылу өткізгіштігі мен жасыл тығыздығы жоғары компоненттердің ұнтақтарында пайда болуы мүмкін. Сондай-ақ, реагенттің үлкен бөлшектері реакцияның кинетикасы мен оның дәрежесін азайтады, осылайша адиабаталық температура (T_{ad}) төмендейді.



3-сурет – Температура мен энтальпия диаграммасы

Реакция синтезіндегі маңызды параметр адиабатикалық температура болып табылады [30]. Реагенттерді өнімдерге айналдыратын реакция экзотермиялық болып табылады, ал реак-

ция жылдамдығы адиабатикалық жағдайларды қабылдау үшін жоғары болуы керек. Осылайша, қыздыру температурасы жылу жоғалтуымен адиабаттық температураның температурасына байланысты болады деп болжанады. T_{ad} реакция механизмдерін түсіну және жіктеу үшін пайдалы, сонымен қатар нақты реакция кезінде реагенттер мен өнімдерден күтілетін физикалық күйді көрсете алады. Егер T_{ad} реактивтердің де, өнімдердің де қайнау температурасынан төмен болса, онда реакция «газсыз» деп аталады (бу қысымы аз болған жағдайда). Егер T_{ad} реактивтер мен өнімдердің балку температурасынан төмен болса, онда реакция қатты күйде жүреді. Мұндай жағдайларда ұнтақтар алуға болатындығы туралы көптеген зерттеулерде айтылады [31]. Төменде 2-кестеде NiAl қосылыстары үшін адиабаталық температуралары көрсетілген.

1-кесте – ӨЖЖТС кезіндегі NiAl интерметалдық қосылыстардың түзілуінің адиабатикалық температуралары

Интерметалдық қосылыстар	$T_{балку}$, К	ΔH_{298}^0 , кДж/моль	$\Delta H_{ф.н.}^0$, кДж/моль	$T_{ад}$, К
Ni ₃ Al	1668	153.35	34.94	1566
NiAl	1911	117.74	40.03	1911
Ni ₂ Al ₃	1405	170.95	29.43	1405
NiAl ₃	1127	114.39	23.61	1127

Жұмыстарды талқылау

Ұшқын плазмасын пайдалану арқылы жылдам қосалқы агломерация немесе агломераттау технологиясы жоғары қыздыру мен тығыздаудың арқасында шоғырландырудың жаңа тәсілі ретінде қарастырылады. Құю техникасы импульсті электр тогын және металл ұнтақтарын тиімді сығымдау үшін қысымды қолдануды көздейді [32]. Ұшқын плазмасын қолдану кезінде қыздыру мен салқындату жылдамдығы өте жоғары болғандықтан, қажетті құрамдас бөліктері мен бөлшектерді, әртүрлі құрамдағы материалдарды агломерациялағанда оңай басқарылады. Ayodele O. және бірлескен авторлар [33] NiAl интерметалдық қосылысының механикалық қасиеттеріне синтез бен қыздыру жылдамдығының әсерін зерттеді. Бастапқы ұнтақтар ретінде TLS Technik GmbH (Германия) жеткізетін бөлшектердің орташа мөлшері 25 мкм (тазалығы 99,8%) болатын алюминий ұнтағы қолданылды. Стехиометриялық қатынастары

50% болатын никель мен алюминий ұнтақтарын құрғақ ортада ішкі диаметрі 100мм болатын тот баспайтын болаттан жасалған флаконға салды. Өлшемдері 3 мм және 7 мм болатын шарлар тегістеуіштер ретінде қолданылды.

Зерттеу нәтижесінде күйдірілген NiAl микроқұрылымдарының 50°C/мин және 150°C/мин қыздыру жылдамдығы кезінде микроқуыстардың бар екендігі анықталды. 100°C/мин кезінде күйдірілген NiAl үшін ең үлкен қуыстар анықталды. Күйдірілген NiAl рентгендік дифракциялық сызбасы оның шындығының үстемдік шыңы ретінде болатындығын көрсетеді, бірақ жылудың жоғарылауынан кейін шындықтың деңгейі минималды болды. Күйдірілген NiAl тығыздығы қыздыру жылдамдығы 50°C/минден 100°C/мин-қа дейін төмендейді, бұл қуыстың жеткілікті мөлшеріне және қуыстың пайда болу уақыты мен бөлшектердің төменгі қыздыру жылдамдығына үйлесуіне байланысты. Одан әрі жоғарылау 150°C/мин байқалды. Сонымен қатар, микроқаттылық қыздыру жылдамдығының жоға-

рылауымен артады. Синтезделген NiAl қыздыру жылдамдығы 1500°C/мин кезінде механикалық қасиеттерінің жақсарғанын көрсетті.

ӨЖЖТС – жоғарғы жылулық түзілу қасиетіне ие (118,4 кДж/моль) NiAl алудың тиімді әрі эффективті әдісі болып табылады [34]. A. Biswas және бірлескен авторлар [35] NiAl алуды термиялық жарылыс режимінде ӨЖЖТС әдісімен зерттеді. ӨЖЖТС жылулық жарылыс режиміндегі NiAl өңдеу 5-тен 60°C/мин аралығында әр түрлі қыздыру жылдамдығымен зерттелді. Үш түрлі мөлшердегі Ni бөлшектері қолданылды, ал эксперименттер вакуум мен аргон атмосферасында жүргізілді. Нәтижесінде жану кезіндегі үрдіс атмосфераға байланысты емес, бірақ қызу жылдамдығы мен сәйкесінше алдын-ала жану реакциясының дәрежесіне байланысты екенін көрсетті. Процесті модельдеу жылулық жарылыс жағдайындағы жану мен оның алдындағы реакцияға қыздыру жылдамдығының әсерін сипаттауға арналған. Авторлардың пікірінше, бұл модель тәжірибелік зерттеулер нәтижелерін ойдағыдай айқындай алады.

[36] жұмыста Ni₃Al интерметалдық қосылысының ӨЖЖТС режимінде жануының синтезі зерттелді. Элементті ұнтақ қоспаларынан Ni₃Al интерметалдық қосылыстарын өндіру ӨЖЖТС арқылы жүзеге асырылды. Сынаманың бастапқы тығыздығының, алдын-ала қыздыру температурасының және реагенттер бөлшектерінің мөлшерінің жану сипаттамаларына, сондай-ақ дайын өнімдердің құрамы мен морфологиясына әсері зерттелді. Жанудың процесінің сипаттамалары ғана емес, сонымен қатар өнімнің құрамы мен морфологиясы Ni және Al бөлшектерінің мөлшеріне, сынаманы алдын ала қыздыру температурасына және сынаманың бастапқы тығыздығына қатты тәуелді екені анықталды. Рентгендік дифракция анализі Ni₃Al тұратын бір фазалы өнімдердің 200-ден 350°C дейінгі қыздыру температурасында жұқа Ni бөлшектерін қолдана отырып сынамалардан синтезделгенін көрсетті. Алдын ала қыздыру температурасының жоғарылауы Ni₃Al түзілуін жақсартып қана қоймай, сонымен қатар дайын өнімдердің тығыздығын арттырды. Сонымен қатар, жанғыш өнімдердің тығыздығы жасыл үлгінің тығыздығын арттыру арқылы едәуір артқаны анықталды. Осы зерттеудің нәтижелері Ni₃Al қосылысы түрлі салыстырмалы тығыздықтағы 50%-ден 93% дейінгі мөлшерде әртүрлі тәжірибелік жағдайларда ӨЖЖТС көмегімен сәтті алынғанын, соның ішінде сынаманың бастапқы тығыздығының,

реагенттің бөлшектерінің мөлшерін және алдын-ала қыздыру температурасының өзгеруін көрсетті.

Жоғары қуатты шар диірмендерінде механикалық легирлеу – бұл тепе-теңдік пен тепе-теңдіксіз металл фазаларының кең спектрін шығаруға қабілетті технологиялық процесс [37]. Сонымен қатар, Ni және Al ұнтақ қоспалары механикалық түрде араластырылған кезде олардың түзілуі ұнтақтау уақытында біртіндеп жүреді немесе кенеттен белгілі бір тегістеу уақытынан кейін пайда болатын механикалық қоздырылған реакцияның (МҚР) нәтижесінде пайда болады, ол тұтану уақыты деп аталады [38].

[39] жұмыста авторлар тегістеу параметрлерінің механикалық легирлеу арқылы NiAl интерметалдық қосылыстарының синтезіне әсерін зерттеді. NiAl интерметалдық қосылысы Spex диірменінде Ni және Al ұнтақтарының элементар қоспаларын механикалық легирлеу арқылы синтезделді. Қосылыстың түзілуі МҚР сәйкес болды, және тегістелетін айнымалылардың оның тұтану уақытына әсері факторлық конструкцияны қолдану арқылы анықталды. NiAl интерметалдық қосылысы Ni және Al ұнтақ қоспаларын механикалық легирлеуден кейін сәтті алынды. Сонымен қатар, қосылыстардың пайда болуы кезінде МҚР анықталды. Шарикті 7:1-ден 10:1-ге ауыстырған кезде оның ұнтаққа әсері басқаларға қарағанда едәуір жоғары екендігі және тұтанудың орташа уақыты 19 минут ішінде азайғандығы байқалды. Екінші жағынан, шарик және никель ұнтақтарын қолдану орташа тұтану уақытын сәйкесінше 5,7 және 4,6 минутқа арттырды. Сонымен қатар, қарастырылған механикалық легирлеу жағдайында шар-ұнтақ қатынасы, процесті басқарушы зат пен шарлар жиынтығы ұсақталған ұнтақтар бөлшектерінің орташа мөлшерін басқарады, бұл бір тегістеу параметрінің басқа айнымалылардың әсерін өзгерте алатындығын көрсетеді.

Енауәті және бірлескен авторлар [40] NiAl наноқұрылымды қосылысты планетарлық диірменде бастапқы элемент ұнтағынан механикалық легирлеу арқылы алды. Механикалық легирлеудің бұл жағдайында NiAl интерметалдық қосылысы Ni мен Al МҚР жағдайында емес, қабаттардың шекараларындағы тұрақты диффузиялық реакциясы нәтижесінде түзіледі.

Тұрақты химиялық, механикалық қасиеттері және металл мен керамикамен жақсы үйлесімділігін ескере отырып, интерметалдық қосылыстар атмосфералық плазмамен бүрку арқылы (АПБ) Mg қорытпасында жылулық

тосқауыл жабыны (ЖТЖ) ретінде дайындалады. Тұтқыр жабынның оңтайлы материалы мен қорғаныс сипаттамалары бар Mg қорытпасына арналған ЖТЖ әзірлеу үшін интерметалдық қосылыстардың байланыстырушы жабынының тұрақтылығы мен қорғалуын жүйелі түрде зерттеу керек. V_2 құрылымы бар NiAl интерметалдық қосылысы оның төмен тығыздығы, жоғары балку температурасы, қоршаған ортаның деградациясына тамаша төзімділігі және жоғары температурада жақсы механикалық және химиялық тұрақтылығы сияқты керемет қасиеттерінің нәтижесінде үлкен қызығушылық тудыруда [41].

Х. Fan және бірлескен авторлар [42] NiAl интерметалдық қосылысын магний қорытпасындағы жылу тосқауылдары үшін байланыстырушы жабын ретінде зерттеді. Тұтқыр жабындар Mg қорытпасына жабылған 8YSZ ЖТЖ тұрақтылығын басқаруда маңызды рөл атқарады. Бұл зерттеуде Ni-Al қоспасынан металл реакциялық плазмалық бүрку (РПБ) көмегімен байланыстырушы жабын түрінде шашыратылды. Сонымен қатар, Ni-Al интерметалдық қосылысы ӨЖЖТС әдісімен алынды. Таза NiAl интерметалдық қосылысы байланыстырғыш жабын ретінде АПБ әдісі арқылы шашыратылды. Алынған байланыстырушы жабындардың микроқұрылымы, құрамы, адгезиялық тұрақтылығы және коррозияға төзімділігі Mg қорытпасы негізінде ЖТЖ үшін оңтайлы байланыстырушы жабынды табу негізінде зерттелді. Нәтижелер NiAl-дан тұратын байланыс қабаттары өте жақсы байланыс тұрақтылығын көрсететінін дәлелдеді. Жоғары Ni-Al РПБ әдісімен алынған жабындының беріктігі созылуға әкеледі. АПБ әдісі көмегімен алынған Ni-Al байланыстырғыш жабыны негізінен жылулық кеңею, жақсы механикалық және коррозияға төзімділік қасиеттерімен ерекшеленді.

ӨЖЖТС процестері сонымен қатар жүйенің динамикалық модельдері ретінде де белгілі. Іс жүзінде әртүрлі химиялық жүйелерде немесе әртүрлі өңдеу параметрлері бар тәжірибелер (мысалы, реагент ұнтақтарының сұйылту дәрежесі мен дән мөлшері) таралу режимдерінің кең спектрін көрсетті. Бұл динамикалық ерекшеліктер алынған өнімдердің табиғаты мен функционалды қасиеттеріне әсер етуіне байланысты қолданылу тұрғысынан эксперименталды түрде зерттелді [43].

[44] жұмыста интерметалдық қосылыстардың ӨЖЖТС динамикалық әрекетін зерттеді. ӨЖЖТС процестің әр түрлі гетерогенді химиялық кезеңдерін ескере отырып, сандық түрде

әртүрлі реакциялық энтальпиялармен қоса зерттелді. Реакцияға түсетін таблеткалардың бойлық осі бойымен және көлденең жазықтықта таралу тұрақсыздығы реакцияның энтальпиясымен байланысты болатыны анықталды. Бойлықтың тұрақты таралуы экзотермиялық жүйелердің көпшілігінде де, азында да байқалды. Көлденең және бойлық тұрақсыздықтардың өрістері өзара ерекше болып көрінеді. Экзотермиялықтың әртүрлі диапазондары $H_0 = -53$ кДж/моль эталондық жағдайға қатысты қатты қосылыстың пайда болуының энтальпиясын өзгерту жолымен таза элементтерден жасалған интерметалдық қосылыстар ӨЖЖТС үшін зерттелді. Зерттелетін диапазон жойылу кезінен бастап энтальпия қалыптасуының маңызды мәндеріне дейінгі барлық маңызды жағдайларды қамтиды (-49 кДж/моль $\leq H_0 \leq -60$ кДж/моль). Жүйенің көлденең және бойлық тұрақсыздықтары анықталды, бірақ олардың таралу аумақтары өзара ерекше болып көрінді.

Жану синтезі (ЖС) интерметалдық қосылыстар, керамикалар, катализаторлар, композиттер мен қорытпалар сияқты заманауи материалдардың кең спектрін синтездеу мен өңдеудің маңызды әдісі ретінде жүзеге асырылады [45]. ЖС көбінесе компоненттер арасындағы химиялық реакцияның экзотермиялық сипатымен, жоғары температурамен, реакцияның қысқа уақытымен және процестің тәуелсіз жүруімен сипатталады [46]. ЖС материалдарды дайындаудың тартымды, тиімді және кең зерттелген әдісі болса да, реакция механизмдері мен процесс кинетикасына әсер ететін факторлар, әсіресе микроқұрылым деңгейінде әлі толық зерттелмеген әдіс болып табылады [47]. Процестің осы аспектілерін анықтау үшін әртүрлі зерттеушілер сандық моделдеуді қосымша талдау құралы ретінде пайдаланып келеді [48].

R. Nikbakht және бірлескен авторлар [49] NiAl ӨЖЖТС синтездеу процесін фаза-өрістік модельдеу әдісімен зерттеді. Фаза-өрістік модель интерметалдық қосылыстардың жоғары температуралы синтезін модельдеу үшін қолданылады. Модель термодинамикалық тұжырымға негізделген, оған химиялық реттелген фазалардың пайда болуы және сәйкес жылу шығарылуы кіреді. Бұл модельдің интерметалдық қосылыстардың жоғары температуралы синтезін модельдеудің алдыңғы тәсілдерінен айырмашылығы, микроқұрылым деңгейінде процестің кинетикасын талдауда қолданыла алады. Фазалық өріс моделі де

интерметалдық қосылыстардың жоғары температуралы синтезін модельдеу үшін сәтті қолданылып келеді. Ол микроқұрылымдық және жылу деңгейіндегі NiAl жоғары температуралық синтезінің негізгі ерекшеліктерін көрсетеді. Бір өлшемді және екі өлшемді моделдеу қатты никель мен сұйық алюминий арасындағы бөліну шекарасында химиялық реттелген интерметалды фазалардың тез түзілуін және оның қатты никель ядросы бағытында өсуін көрсетеді. Модель бөлшектер мөлшерінің ӨЖЖТС таралу жылдамдығына әсерін көрсету үшін де қолданылды.

Қазіргі таңда NiAl интерметалдық қосылыстарды синтездеу үшін ӨЖЖТС [50], жану синтезі мен ыстық престеу [51], шашырау [52] және лазерлік қаптау [53] сияқты перспективті әдістер кеңінен қолданылып келеді. Бұл әдістердің ішінде лазерлік қаптаудың ерекше маңызы бар, себебі ол шағын микроқұрылымға ие интерметалдық және интерметалдық композитті жабындыларды, сондай-ақ субстрат пен металлургиялық қосылыстарды тиімді үйлестіре алады [54]. Сондықтан [55] жұмыста авторлар $\text{Cr}_{18}\text{Ni}_9\text{Ti}$ тот баспайтын болаттан жасалған төсеніште NiAl интерметалдық қосылыстан жабын жасау үшін лазерлік қаптау әдісін пайдаланды.

Ni/Al 1:1 атомдық қатынасы бар коммерциялық қол жетімді Al (30-150 мкм, тазалығы 99,5%) және Ni (~75 мкм, тазалығы 99,0%) ұнтақтары лазермен қапталған NiAl интерметалдық жабынын жасау үшін бастапқы материалдар ретінде пайдаланылды. NiO, Ni_2O_3 , Al_2O_3 және NiAl_2O_4 , сондай-ақ Ni_3Al фазаларынан тұратын глазурь қабаты жоғары температурада сырғудан кейін NiAl жабынының тозған бетінде қалыптасты. Бұдан басқа, ол NiAl интерметалл жабындарында 500°C төмен температурада керамикалық шариктен сырғанаған кезде абразивті тозу басым болды. NiAl интерметалдық жабындарда температура 500-ден 700°C-ге дейін көтерілген кезде пластикалық деформация және адгезивтік тозу басым болды. Температураның 900°C және одан әрі жоғарылауы NiAl интерметалдық жабыны трибохимиялық реакциялар арқылы жаңа оксид фазаларының пайда болуына байланысты тотығулық тозуға айналды. Сонымен қатар, жоғары температуралы трибологияда қолдану тұрғысынан NiAl интерметаллдық лазермен қапталған жабынның үйкелісті азайту қабілеті мен тозуға төзімділігі арасында ымыраға келу маңызды болуы мүмкін екені болжанды.

Бұл мақалада [56] реакция эволюциясы мен NiAl жану синтезіндегі аралық фазалар температураны дәл өлшеу және жылдам өшіру арқылы зерттелді. Реакция жүйесі ретінде әдеттегі Ni және Al ұнтақтарының орнына Ni және Al көп қабатты пленкалары қолданылды. Жану реакциясы адиабаттық жағдайға жақын жылулық жарылыс режимінде жүргізілді. Температура мен реакция жолдарын бақылау үшін бірнеше термодаралар қолданылды. Микроқұрылымның эволюциясын зерттеу үшін температураны орнында тіркеумен қатар жылдам өшіру әдісі қолданылды. Аралық фазаларды анықтауға көмектесу үшін реакция кезінде адиабатикалық температура құрамның функциясы ретінде есептелді. Тәжірибелік зерттеулер NiAl жану жүйесінің реакциясы алюминийдің үштен бірі балқытылғаннан кейін басталатынын көрсетті. Басынан аяғына дейін реакция үш сатыдан өтеді: бірінші кезеңде жүйенің температурасы алюминийдің балқу нүктесінен NiAl_3 аралық фазасының ыдырау температурасына, яғни 854°C дейін артады.

Реакция механизмі бөліну шекарасында NiAl_3 және Ni_2Al_3 аралық фазаларының пайда болуымен сұйық алюминийде қатты никельді еріту болып табылады. Екінші сатыда температура 854°C-ден 1300°C дейін артады. Реакция әлі де алюминийдің сұйық ерітіндісінде никельді еріту болып табылады. Ni_2Al_3 бастапқы стадияда бөліну шекарасында бола алады, бірақ бұл кезеңде жүйе тек екінші кезеңнің кейінгі бөлігінде никель мен сұйық алюминийдің қатты ерітіндісінен тұрады. Үшінші кезеңде температура шамамен 1300°C-тан 1810°C-қа реакция температурасына дейін көтеріледі. Бұл кезеңде реакция жылдамдығы алғашқы екі кезеңге қарағанда әлдеқайда жоғары. Ең жоғары температураға қол жеткізбес бұрын, үшінші сатыда Al (Ni) ерітіндісінде Ni үздіксіз ерітуге қосымша кем дегенде үш жағдай орын алады. Бұл қатты NiAl қаныққан Al (Ni) ерітіндісінен тұнуы, ал қалғаны Ni мен NiAl балқуы немесе ыдырауы болып табылады. Сондықтан бұл жағдайда жалғыз экзотермиялық реакция бірінші болғандықтан, ол осы кезең үшін басым механизм болуы керек.

Қорытынды

Металл тіреуіші негізіндегі қатты оксидті отын элементтері отын элементтерінің келесі ұрпағы ретінде қарастырылады. Бұл қатты оксидті отын элементтері үшін металл тіреуіштерді пайдала-

ну отын ұяшығын өндірудің құнын төмендетеді және беріктігін арттырады. Сондықтан металл тіреуіші негізіндегі қатты оксидті отын элементтері үшін металл тіреуіштерін дұрыс таңдау маңызды мәселелердің бірі болып табылады. Осы қысқаша шолу мақалада әртүрлі авторлардың NiAl интерметалдық қосылыстарының өндірісі мен синтезіне қатысты зерттеулерінің нәтижелерін егжей-тегжейлі талқыладық. Олар NiAl синтезінде әртүрлі әдістерді қолданды. Осы әдістердің ішінен көптеген авторлар өз зерттеулерінде ӨЖЖТС және жылулық жарылыс әдістерін кеңінен

пайдаланды. Зерттеулердің нәтижесі бойынша екі әдіс де перспективалы және ең жақсы сипаттамаларға ие, олар: жоғары температура мен қысқа синтез уақыттары, процесті басқару мүмкіндігі, энергияның төмен шығыны және құрал-жабдықтың қарапайымдылығы, өнімнің көп мөлшері және оның тазалығы сияқты синтездеу мүмкіндіктері болып табылады. Шолу мақалада сонымен қатар синтездің термодинамикасы да қысқаша талқыланды, нәтижесінде адиабатикалық температура интерметалдық қосылыстар синтезінде маңызды параметр болатындығы анықталды.

Әдебиеттер

- 1 Tucker M.C. Progress in metal-supported solid oxide fuel cells: a review. *J Power Sources*. – 2010. – Vol.195. – P.4570-4582
- 2 Mahato N., Banerjee A., Gupta A., Omar S., Balani K. Progress in material selection for solid oxide fuel cell technology: A review // *Progress in Materials Sci.* – 2015. – Vol.72. – P.141-337.
- 3 Franco T, Brandner M, Ru'ttinger M, Kunschert G, Venskutonis A, Sigl LS. Recent development aspects of metal supported thin-film SOFC // *ECS Trans.* – 2009. – Vol.25. – P.681-688.
- 4 Rose L., Kesler O., Decès-Petit C., Troczynski T., Maric R. Characterization of porous stainless steel 430 for low and intermediate-temperature solid oxide fuel cell (SOFC) substrates // *Int J Green Energy*. – 2009. – Vol.6. – P.638-645
- 5 Horton J.A., Liu, C.T., George E.P. Shape memory properties of a two-phase NiAl plus Fe alloy // *Materials Science and Engineering: A*. – 1995. – Vol.192-193. – P.873-880.
- 6 H.Z. Cui, L.L. Cao, J. Wu. Unique microstructure of porous NiAl intermetallic compound prepared by combustion synthesis // *J. Porous Mater.* – 2012. – Vol.19. – P.415-422
- 7 Deluque Toro C.E., Ramos de Debiaggi S., Monti A.M. Study of cohesive, electronic and magnetic properties of the Ni–In intermetallic system // *Physica B: Condensed Matter*. – 2012. – Vol.407(16). – P.3236-3239.
- 8 H.X. Dong, Y.H. He, Y. Jiang, L. Wu, J. Zou, N.P. Xu, B.Y. Huang, C.T. Liu. Effect of Al content on porous Ni-Al alloys, materials science and engineering: structural materials, properties // *Microstructure Process*. – 2011. – Vol.528. – P.13-14
- 9 Alizadeh Mostafa, Mohammadi Ghaffar. Effect of Intrapulmonary Inhalation of Honey, Nigella Sativa and Curcumin on Liver Function in Patients with Chronic Liver Disease // *Mater. Lett.* – 2012. – Vol.67. – P.148-154
- 10 Hammel E.C, Ikhodaro L.R, Okoli O.I. Processing and properties of advanced porous ceramics: An application based review // *Ceramics International*. – 2014. – Vol.40. – P.15351-15370.
- 11 Медведев А.Б, Трунин Р.Ф. Ударное сжатие пористых металлов и силикатов // *УФН*. – 2012. – Vol.182. – P.829-846
- 12 He Y.H., Jiang Y., Xu N.P., Zou J., Huang B.Y., Liu C.T., Liaw P.K. Fabrication of Ti-Al Micro/ Nanometer-Sized Porous Alloys through the Kirkendall Effect // *Advanced Materials*. – 2007. – Vol.19(16). – P.2102-2106.
- 13 Jiang Y., He Y.H., Xu N.P., Zou J., Huang B.Y., Liu C.T. Effects of the Al content on pore structures of porous Ti-Al alloys // *Intermetallics*. – 2008. – Vol.16(2). – P.327-332.
- 14 Nakajima H. (2010). Fabrication, properties, and applications of porous metals with directional pores // *Proc. of the Japan Academy, Series B*. – 2010. – Vol.86(9). – P.884-899.
- 15 Dong H.X., Jiang Y., He Y.H., Zou J., Xu N.P., Huang B.Y., Liaw P.K. Oxidation behavior of porous NiAl prepared through reactive synthesis // *Materials Chemistry and Physics*. – 2010. – Vol.122(2-3). – P.417-423.
- 16 Han Y. Mechanical and tribological properties of NiAl/muscovite composites // *J. Alloy. Comp.* – 2018. – Vol.741. – P.765-774.
- 17 M.B. Rahaei, D. Jia. Processing behavior of nanocrystalline NiAl during milling, sintering and mechanical loading and interpretation of its intergranular fracture // *Eng. Fract. Mech.* – 2014. – Vol.132. – P.136-146.
- 18 Pike L.M., Chang Y.A., Liu C.T. Solid-solution hardening and softening by Fe additions to NiAl // *Intermetallics*. – 1997. – Vol.5(8). – P.601-608.
- 19 K. Matsuura, K. Ohsasa, N. Sueoka, M. Kudoh. Nickel monoaluminide coating on ultralow-carbon steel by reactive sintering // *Met. Mater. Trans A*. – 1999. – Vol.30(6). – P.1605-1612
- 20 J. Subrahmanyam, M. Vijayakumar. Self-propagating high-temperature synthesis // *J. Mater. Sci.* – 1992. – Vol.27. – P.6249-6273
- 21 Saraiva J.C., Santos D.B. Synthesis and Characterization of Ni-Al Intermetallics Compounds with Grain Refinement Em-

- phasis // *Materials Science Forum*. – 2003. – Vol.426-432. – P.1619–1624. DOI:10.4028/www.scientific.net/msf.426-432.1619
- 22 Ren W.L., Guo J.T., Li G.S., Wu J.S. (2004). The critical temperature for brittle-to-ductile transition of intermetallic compound based on NiAl // *Materials Letters*. – 2004. – Vol.58(7-8). – P.1272-1276.
- 23 Найбороденко Ю.С., Итин В.И., Савицкий К.В. Экзотермические эффекты при спекании смеси порошков никеля и алюминия // *Изв.вузов.Физика*. – 1968. – №10. – С.27-35
- 24 Мержанов А.Г., Боровинская И.П. Самораспространяющийся высокотемпературный синтез неорганических соединений // *Докл.АН СССР*. – 1972. – Т.204. – № 2. – С.366-369.
- 25 Мержанов А.Г. Самораспространяющийся высокотемпературный синтез // *Физическая химия. Современные проблемы*. – М.: Химия – 1983. – С.6-45.
- 26 Амосов А.П., Боровинская И.П., Мержанов А.Г. Порошковая технология самораспространяющегося высокотемпературного синтеза материалов: Учеб. пособие // Под научной редакцией В.Н. Анциферова. – М.: Машиностроение-1, 2007.
- 27 Самсонов Г.В., Виноцкий И. М. Тугоплавкие соединения. – М.: Металлургия. – 1976. – 560 с.
- 28 Франк-Камснецкий Д.А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. – М.: Наука. – 1967. – 491 с.
- 29 Итин В.И., Найбороденко Ю.С. Высокотемпературный синтез интерметаллических соединений. – Томск: Изд-во Том. ун-та. – 1989. – 214 с
- 30 Barzykin V.V. Initiation of SHS processes // *of Pure Appl.Chem*. – 1992. – Vol.64(7). – P.909-918
- 31 Morsi K. Review: reaction synthesis processing of Ni-Al intermetallic materials // *Materials Science and Engineering*. – 2001. – Vol.A299. – P.1-15
- 32 Suarez M., Fernandez A., Menendez J.L., Torrecillas R.U., Hennicke J., Kessel T. Challenges and Opportunities for Spark Plasma Sintering: A Key Technology for a New Generation of Materials // *Sintering Applications*. – 2013. – P.320-342.
- 33 Ayodele O.O., Awotunde M.A., Adegbenjo A.O., Shongwe M.B., Obadele B.A., Olubambi P.A. Synthesis and heating rate effect on the mechanical properties of NiAl intermetallic compound // *Materials Today: Proceedings*. – 2020. – P.1-4.
- 34 Kubaschewski O, Alcock C.B, Spencer P.J. *Materials thermochemistry* 6th ed. – Oxford: Pergamon. – 1993.
- 35 Biswas A., Roy S.K., Gurumurthy K.R., Prabhu N., Banerjee S. (2002). A study of self-propagating high-temperature synthesis of NiAl in thermal explosion mode // *Acta Materialia*. – 2002. – Vol.50(4). – P.757-773. DOI:10.1016/s1359-6454(01)00387-1
- 36 Yeh C.L., Sung W.Y. Combustion synthesis of Ni3Al intermetallic compound in self-propagating mode // *Journal of Alloys and Compounds*. – 2004. – Vol.384(1-2). – P.181-191. DOI:10.1016/j.jallcom.2004.04.116
- 37 Suryanarayana C. Mechanical alloying and milling // *Prog.Mater.Sci*. – 2001. – Vol.46. – P.1-184.
- 38 Takacs L. Self-sustaining reactions induced by ball milling // *Prog. Mater. Sci*. – 2002. – Vol.47. – P.355-414.
- 39 Kubaski E. T., Cintho O.M., Capocchi J.D. Effect of milling variables on the synthesis of NiAl intermetallic compound by mechanical alloying // *Powder Technology*. – 2011. Vol.214(1). – P.77-82.
- 40 Enayati M.H., Karimzadeh F., Anvari S.Z. Synthesis of nanocrystalline NiAl by mechanical alloying // *J. Mater. Process. Technol*. – 2008. – Vol.200. – P.312-315.
- 41 Wang Y., Wang Z., Yang Y., Chen W. The effects of ceria on the mechanical properties and thermal shock resistance of thermal sprayed NiAl intermetallic coatings // *Intermetallics*. – 2008. – Vol.16. – P.682-688.
- 42 Fan X., Zhu L., Huang W. Investigation of NiAl intermetallic compound as bond coat for thermal barrier coatings on Mg alloy // *J of Alloys and Compounds*. – 2017. – Vol.729. – P.617-626.
- 43 Varma A., Lebrat J.P. Combustion synthesis of advanced materials. *Chemical Engineering Science*. – 1992. – Vol.47(9-11). – P.2179-2194.
- 44 Gennari S., Maglia F., Anselmi-Tamburini U., Spinolo G. Dynamic behavior in self-propagating high-temperature synthesis of intermetallic compounds // *Journal of Alloys and Compounds*. – 2006. – Vol.413(1-2). – P.232-238.
- 45 Patil K.C., Aruna S.T., Mimani T. Combustion Synthesis: An Update Current Opinion in Solid State and Materials Science. – 2002. – Vol.6. – P.507-512.
- 46 Karen S. Martirosyan. Carbon Combustion Synthesis of Ceramic Oxide Nanopowders // *Advances in Science and Technology*. – 2010. – Vol.63. – P.236-245.
- 47 McCauley J.W., Puszynski J.A. Historical perspective and contribution of US researchers into the field of self-propagating high-temperature synthesis (SHS)/combustion synthesis (CS): Personal reflections // *Intern. J. of Self-Propagating High-Temperature Synthesis*. – 2008. – Vol.17(1).
- 48 Gunduz I.E., Fadenberger K., Kokonou M., Rebholz C., Doumanidis C.C. Investigations on the self propagating reactions of nickel and aluminum multilayered foils // *Applied Physics Letters*. – 2008. – Vol.93(13). – P. 134-141.
- 49 Nikbakht R., Assadi H. Phase-field modelling of self-propagating high-temperature synthesis of NiAl // *Acta Materialia*. – 2012. – Vol.60(10). – P.4041-4053.
- 50 Zhu S.Y., Bi Q.L., Niu M.Y., Yang J., Liu W.M. Tribological behavior of NiAl matrix composites with addition of oxides at high temperatures // *Wear*. – 2012. – Vol.274–275. – P.423-434.
- 51 Kurbatkina V.V., Patsera E.I., Levashov E.A., Timofeev A.N. Self-propagating high-temperature synthesis of single-phase binary tantalum-hafnium carbide (Ta,Hf) C and its consolidation by hot pressing and spark plasma sintering // *Ceramics Interna-*

tional. – 2018. – Vol.44(4). – P.4320-4329.

52 Singrathai S., Rachpech V., Niyomwas S. A Thermal Coating Process Using Self-Propagating High-Temperature Synthesis Assisted Flame Spray Coating Process // *Energy Procedia*. – 2011. – Vol.9. – P.398-403.

53 Zhang Y.L., Li J., Zhang Y.Y., Kang D.N. Evolution in microstructure and high-temperature oxidation behaviors of the laser-cladding coatings with the Si addition contents // *Journal of Alloys and Compounds*. – 2020. – Vol.827. – P.154131.

54 Yu Y.J., Zhou J.S., Chen J.M., Zhou H.D., Guo C., Wang L.Q., Yang L.B. Preparation, microstructure and tribological behavior of laser cladding NiAl intermetallic compound coatings // *Wear*. – 2012. Vol.274-275. – P.298-305.

55 Yu Y., Zhou J., Ren S., Wang L., Xin B., Cao S. Tribological properties of laser cladding NiAl intermetallic compound coatings at elevated temperatures // *Tribology International*. – 2016. – Vol.104. – P.321-327.

56 P. Zhu, J.C. Li, C.T. Liu. Reaction mechanism of combustion synthesis of NiAl // *Materials Science and Engineering*. – 2002. – Vol.A329-331. – P.57-68

References

- 1 M.C. Tucker, *J. Power Sources*, 195, 4570-4582 (2010).
- 2 N. Mahato, A. Banerjee, et al, *Progress in Materials Science*, 72, 141-337 (2015).
- 3 T. Franco, M. Brandner, et al, *ECS Trans*, 25, 681-688 (2009).
- 4 L. Rose, O. Kesler, et al, *Int J Green Energy*, 6, 638-645 (2009).
- 5 J.A. Horton, C.T. Liu, and E.P. George *Materials Science and Engineering: A.*, 192-193, 873-880 (1995).
- 6 H.Z. Cui, L.L. Cao and J. Wu, *J. Porous Mater*, 19, 415-422 (2012).
- 7 Deluque Toro C.E., Ramos de Debiaggi S. and Monti A.M. *Physica B: Condensed Matter*, 407(16), 3236-3239 (2012).
- 8 H.X. Dong, Y.H. He, et al, *Microstructure Process*, 528, 13-14 (2011).
- 9 Alizadeh Mostafa, Mohammadi Ghaffar. *Mater. Lett.*, 67, 148-154 (2012).
- 10 Hammel E.C, Ighodaro L.R and Okoli O.I. *Ceramics International*, 40, 15351-15370 (2014).
- 11 A.B. Medvedev, R.F. Trunin *UFN*, 182, 829-846 (2012). (in Russ)
- 12 Y.H. He, Y. Jiang, et al, *Advanced Materials*, 19(16), 2102-2106 (2007).
- 13 Y. Jiang, Y.H. He, et al, *Intermetallics*, 16(2), 327-332 (2008).
- 14 H. Nakajima, Fabrication, properties, and applications of porous metals with directional pores, *Proc.. of the Japan Academy, Series B*. – 2010. – Vol.86(9). – P.884-899 (2010).
- 15 H.X. Dong, Y. Jiang, et al, *Materials Chemistry and Physics*, 122(2-3), 417-423 (2010).
- 16 Y. Han, *J. Alloy. Comp.*, 741, 765-774 (2018).
- 17 M.B. Rahaei, D. Jia, *Eng. Fract. Mech.*, 132, 136-146 (2014).
- 18 L.M. Pike, Y.A. Chang, and C.T. Liu, *Intermetallics*, 5(8), 601-608 (1997).
- 19 K. Matsuura, K. Ohsasa, et al, *Met. Mater. Trans A.*, 30(6), 1605-1612 (1999).
- 20 J. Subrahmanyam, M. Vijayakumar, *J. Mater. Sci.*, 27, 6249-6273 (1992).
- 21 J.C. Saraiva, D.B. Santos *Materials Science Forum*, 426-432, P.1619-1624 (2003).
- 22 W.L. Ren, J.T. Guo, et al, *Materials Letters*, 58(7-8), 1272-1276 (2004).
- 23 Yu.S. Nayborodenko, V.I. Itin, and K.V. Savitsky, *Izv.vuzov. Physics*, 10, 27-35 (1968). (in Russ)
- 24 A.G. Merzhanov, I.P. Borovinskaya, *Dokl. AN SSSR*, 204, 2, 366-369 (1972). (in Russ)
- 25 A.G. Merzhanov *Physical chemistry. Contemporary issues*, (Moscow, Chemistry, 1983), pp.6-45. (in Russ)
- 26 A.P. Amosov, I.P. Borovinskaya, and A.G. Merzhanov *Poroshkovaya tekhnologiya samorasprostranyayushchegosya vysokotemperaturnogo sinteza materialov: Ucheb. posobiye*, (Moscow, Mechanical Engineering, 1, 2007). (in Russ)
- 27 G.V. Samsonov, I.M.Vinitsky, *Tugoplavkiye soyedineniya* (Moscow, Metallurgy, 1976), 560p. (in Russ)
- 28 D.A. Frank-Kamsnetskiy, *Diffuziya i teploperedacha v khimicheskoy kinetike*, (Moscow, Science, 1967), 491p. (in Russ)
- 29 V.I. Itin, Yu.S. Nayborodenko, *Vysokotemperaturnyy sintez intermetallicheskih soyedineniy*, (Tomsk, Izd-vo Tom. un-ta, 1989), 214p. (in Russ)
- 30 V.V. Barzykin, *Pure Appl.Chem.*, 64(7), 909-918 (1992).
- 31 K. Morsi, *Materials Science and Engineering*, A299, 1-15 (2001).
- 32 M. Suarez, A. Fernandez, et al, *Sintering Applications*, 320-342 (2013).
- 33 O.O. Ayodele, M.A. Awotunde, et al, *Materials Today: Proceedings*, 1-4 (2020).
- 34 O. Kubaschewski, C.B. Alcock, and P.J. Spencer *Materials thermochemistry* 6th ed., (Oxford: Pergamon, 1993).
- 35 A. Biswas, S.K. Roy, et al, *Acta Materialia*, 50(4), 757-773 (2002).
- 36 C.L. Yeh, W.Y. Sung, *Journal of Alloys and Compounds*, 384(1-2), 181-191 (2004).
- 37 C. Suryanarayana, *Prog.Mater.Sci.*, 46, 1-184 (2001).
- 38 L. Takacs, *Prog. Mater. Sci*, 47, 355-414 (2002).
- 39 E.T. Kubaski, O.M. Cintho and J.D. Capocchi *Powder Technology*, 214(1), 77-82 (2011).
- 40 M.H. Enayati, F. Karimzadeh, and S.Z. Anvari, *J. Mater. Process. Technol*, 200, 312-315 (2008).
- 41 Y. Wang, Z. Wang, et al, *Intermetallics*, 16, 682-688 (2008).

- 42 X. Fan, L. Zhu and W. Huang, *Journal of Alloys and Compounds*, 729, 617-626 (2017).
- 43 A. Varma, J.P. Lebrat, *Chemical Engineering Science*, 47(9-11), 2179-2194 (1992).
- 44 S. Gennari, F. Maglia, *Journal of Alloys and Compounds*, 413(1-2), 232-238 (2006).
- 45 K.C. Patil, S.T. Aruna and T. Mimani. *Combustion Synthesis: An Update Current Opinion in Solid State and Materials Science*, 6, 507-512 (2002).
- 46 K.S. Martirosyan, *Advances in Science and Technology*, 63, 236-245 (2010).
- 47 J.W. McCauley, J.A. Puszynski. *Int.J. of Self-Propagating High-Temperature Synthesis*, 17(1), 58-75 (2008).
- 48 I.E. Gunduz, K. Fadenberger, et al, *Applied Physics Letters*, 93(13), 134-141 (2008).
- 49 R. Nikbakht, H. Assadi, *Acta Materialia*, 60(10), 4041-4053 (2012).
- 50 S.Y. Zhu, Q.L. Bi, et al, *Wear*, 274-275, 423-434 (2012).
- 51 V.V. Kurbatkina, E.I. Patsera, et al, *Ceramics International*, 44(4), 4320-4329 (2018).
- 52 S. Singrathai, V. Rachpech and S. Niyomwas, *Energy Procedia*, 9, 398-403 (2011).
- 53 Y.L. Zhang, J. Li, Y.Y. Zhang and D.N. Kang, *Journal of Alloys and Compounds*, 827, 154131 (2020).
- 54 Y.J. Yu, J.S. Zhou, et al, *Wear*, 274-275, 298-305 (2012).
- 55 Yu Y., Zhou J., *Tribology International*, 104, 321-327 (2016).
- 56 P. Zhu, J.C. Li and C.T. Liu. *Materials Science and Engineering*, A329-331, 57-68 (2002).

Г.Қ. Мұсабек^{1,2*}, Д. Ермұхамед¹, С.З. Бақтыгерей¹,
Р.Б. Асилбаева³, М.Н. Қалимолдаев², Г.А. Амирханова², В. Сиваков⁴

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

²Ақпараттық және есептеуіш технологиялар институты, Қазақстан, Алматы қ.

³Yessenov University, Қазақстан, Ақтау қ.

⁴Лейбниц атындағы Фотондық технологиялар институты, Германия, Йена қ.

*e-mail: Gauhar.musabek@kaznu.kz

ЖАРЫҚ ҮНТАЛАНДЫРҒАН СҮТЕГІ ГЕНЕРАЦИЯСЫНДА КРЕМНИЙ НАНОҚҰРЫЛЫМДАРЫН ҚОЛДАНУДЫҢ АРТЫҚШЫЛЫҚТАРЫ МЕН БОЛАШАҒЫ

Сутегі энергетикасы жалпы заманауи энергетиканы дамытудың әрі экологиялық таза, әрі болашағы зор бағыттарының бірі, ал катализатор мен күн энергиясын қолдана отырып судан қажетті отыны – сутегін өндірудің қарапайым және қол жетімді әдістерінің бірі болып табылады. Суды молекулалық сутегі мен оттегіне ажырату реакциясындағы фотокатализатор ретінде қолдануға жарамды жартылайөткізгіштерді іздеу өзекті тақырыптардың біріне айналған. Келтірілген әдеби шолуда фотокатализдік реакцияларының үдеткіші ретінде қолданылатын кремний наноматериалдарын алу және синтездеудің әртүрлі әдістері және олардың физика-химиялық қасиеттері сипатталған. Мақалада кремний наноталшықтары, кремний нанобөлшектері, кремний нанонүктелері және кеуекті құрылымдар сияқты әртүрлі геометрияда кездесетін кремний наноматериалдарын фотокаталитикалық қолданыстарда пайдаланудың тиімділігі талқыланған. Жарияланған тәжірибелік және теориялық жұмыстардың деректерін пайдаланып кремний нанокұрылымдарын жартылайөткізгіш катализатор ретінде қолданғандағы жарық ынталандырған судың молекулаларының фотокаталитикалық ыдырау реакцияларының механизмдері қарастырылған. Сонымен қатар, кремний нанокұрылымдарының негізінде алынатын гетероауысымды гибриді наноматериалдарын фотокатализдік процестердегі сутегінің шығу тиімділігін арттыру мақсатында қолданылуы да айтылып, артықшылықтары мен кемшіліктері көрсетілген. Қорытынды ретінде кремний нанокұрылымдарын алу және олардың фотокаталитикалық қасиеттерін зерттеу мәселесінің жай-күйіне баға берілген.

Түйін сөздер: кремний нанокұрылымдары, фотокатализ, судың ыдырауы.

G.K. Mussabek^{1,2}, D. Yermukhamed¹, S.Z. Baktygeri¹,
R.B. Assilbayeva³, M.N. Kalimoldayev², G.A. Amirkhanova², V. Sivakov⁴

¹Al-Farabi Kazakh National University, Kazakhstan, Almaty,

² Institute of Information and Computational Technologies, Kazakhstan, Almaty

³Yessenov University, Kazakhstan, Aktau

⁴ Leibniz Institute of Photonic Technology, Germany, Jena

*e-mail: Gauhar.musabek@kaznu.kz

Advantages and prospects for using silicon nanostructures for solar driven hydrogen generation

Hydrogen energy is one of the promising eco-friendly directions in the development of modern energy, and the production of hydrogen from water using a catalyst and solar energy is one of the simple and affordable methods for producing the necessary fuel. The search for suitable semiconductors for use as photocatalysts for water splitting into molecular hydrogen and oxygen is to be considered an urgent subject. The present work is devoted to a review of modern literature data on the preparation, description of the main physicochemical properties, and application of silicon nanostructures of various geometries as photocatalysts for hydrogen generation by splitting of water. In paper, we describe various methods for the preparation and synthesis of silicon nanomaterials with different geometries: silicon nanowires, silicon nanoparticles, silicon nanodots and porous structures. In addition, we consider the advantages and disadvantages of using heterojunction hybrid nanomaterials based ofn silicon nanostructures in photocatalytic processes to increase the efficiency of hydrogen evolution. Based on the data of published experimental and theoretical works, the mechanism of solar driven water splitting and the use of silicon

nanostructures as a semiconductor catalyst is discussed. In conclusion, an assessment of the state of the problem of obtaining and studying the photocatalytic properties of silicon nanostructures is given.

Key words: silicon nanostructures, photocatalysis, water splitting.

Г.К. Мусабек^{1,2}, Д. Ермухамед¹, С.З. Бактыгерей¹,
Р.Б. Асилбаева³, М.Н. Калимолдаев², Г.А. Амирханова², В. Сиваков⁴

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

²Институт информационных и вычислительных технологий, Казахстан, г. Алматы

³Yessenov University, Казахстан, г. Актау

⁴Лейбниц Институт фотонных технологий, Германия, г. Йена

*e-mail: Gauhar.musabek@kaznu.kz

Преимущества и перспективы использования кремниевых наноструктур для фотокаталитической генерации водорода

Водородная энергетика является одним из перспективных экологичных направлений развития современной энергетики, а производство водорода из воды с использованием катализатора и солнечной энергии является одним из простых и доступных методов получения необходимого топлива. Поиск подходящих полупроводников для использования в качестве фотокатализаторов в реакции расщепления воды на молекулярный водород и кислород считается актуальной темой. Настоящая работа посвящена обзору современных литературных данных по получению, описанию основных физико-химических свойств и применению кремниевых наноструктур различной геометрии в качестве фотокатализаторов для генерации водорода путем разложения воды. В работе приводится описание различных методов получения и синтеза кремниевых наноматериалов с различной геометрией: кремниевых нанонитей, кремниевых наночастиц, кремниевых наноточек и пористых структур и их основных физико-химических свойств. Также приводятся данные о преимуществах и недостатках использования гетеропереходных гибридных наноматериалов, получаемых на основе кремниевых наноструктур в фотокаталитических процессах для увеличения эффективности выделения водорода. На основе данных опубликованных экспериментальных и теоретических работ также обсуждается механизм фотокаталитического разложения воды при освещении солнечным светом и использовании кремниевых наноструктур в качестве полупроводникового катализатора реакций. В заключении приведена оценка состояния проблемы получения и исследования фотокаталитических свойств кремниевых наноструктур.

Ключевые слова: кремниевые наноструктуры, фотокатализ, разложение воды.

1. Кіріспе

Қоршаған ортаның ластануы және пайдалы қазба көздерінің сарқылуына байланысты энергия өндіру мен қоршаған ортаны тазартудың экологиялық таза, тиімді технологияларын әзірлеу және енгізу мәселесі қазіргі таңда ерекше өзектілікке ие. Осыған орай сутекті энергетикасы аталған мәселелерін шешу жолындағы өте тиімді шешімдердің бірі болуы әбден мүмкін [1]. Сутекті энергетикасының дамуы аясында қарастырылатын өзекті мәселердің бірі – молекулярлы сутегін өндіріп шығарудың тиімді әрі экологиялық қауіпсіз әдістерін жетілдіру. Осындай әдістерге судың жарық ынталадырған химиялық, яғни фотокатализдік, ыдырауын жатқызамыз [2]. Суды фотокатализдік ыдырату процесстерін жүзеге асыру үшін катализатор ретінде жартылайөткізгіш материалдар қолданылады [3]. Жартылай өткізгіш катализаторлардың ішіндегі ең танымалы және кеңінен қолданылатыны Фуджишима мен Хонданың зертеуші тобы зерттеген титан диоксиді

ұнтақтары (TiO_2) болып саналуда [4]. TiO_2 эффективтілігі жоғары, өте белсенді және қолжетімді фотокатализатор болып табылса да, судың фотокатализдік ыдырауы тек ультракүлгін (УК) жарығының қатысуымен жүзеге асады. Сондықтан соңғы 40 жылдың ішінде УК және көрінетін жарық сәулелерінің әсерінен суды H_2 және O_2 -ге ыдырату үшін әртүрлі фотокатализаторлық материалдар ұсынылған болатын [5,6].

Фотокатализаторлардың көмегімен судың тікелей ыдыратуы таза және қайта өңделуге келетін молекулярлы H_2 -ні кең ауқымды көлемде өндірудің өте тиімді тәсілі болар еді. Сутегінің осындай өндірісін жүзеге асыру үшін өнімділігі жоғары, арзан және экологиялық тұрғыдан қауіпсіз фотокатализаторларды таңдау өте маңызды. Бұл тұрғыдан қарағанда жер шарында кеңінен таралған, сондай-ақ, күн энергиясын түрлендіруде қолданылып, тұрақты жартылайөткізгіш материалдардың қатарына жатқызылатын кремний (Si) суды фотокаталитикалық ыдырату үшін тиімді материал ретінде қарастырылуда [7]. Алайда, монокристалды Si-

дің шағылу коэффициентінің жоғары болуына орай, бетіне түсетін жарықтың 30%-ынан астамы кері шағылып кететіні [8] сутегі түзілуіне кедергі тудыруы мүмкін. Бұл шектеуден пішіндері мен беттік морфологиялары әр түрлі болатын кремний нанокұрылымдарын қалыптастыру арқылы құтылуға болады.

Ұсынылған мақала кремний нанокұрылымдарын фотокатализатор ретінде пайдаланып суды жарық ынталандырған ыдырау кезіндегі молекулалы H_2 бөліп шығару процесстерін зерттеу мен қолдануға қатысты заманауи жетістіктерге шолу жасауға арналған.

2. Кремний нанокұрылымдарының түрлері мен негізгі қасиеттері

Кремний – интегралды микроэлектроникадан биомедицинаға дейін түрлі салаларда қолданылатын арзан және экологиялық тұрғыдан алғанда қауіпсіз жартылай өткізгіштік материал. Кристалды Si ішкі құрылымы алмас тәрізді кубтық тор құратын, валенттілігі 4 тең, IV топ элементі екені белгілі. Si-дің тыйым салынған аймағы тікелей емес және оның ені бөлме температурасы (300 K) жағдайында 1.12 эВ тең [9]. Сондай-ақ, кристалды кремнийдің электр өткізгіштігі, заряд тасымалдаушыларының қозғалғыштығының жоғары мәндерге ие болуы және жарықты спектрдің кең аймағында жұтуы материалды күн сәулесінің қатысуымен жүретін реакциялар мен құбылыстарды қолдануда тиімді етеді.

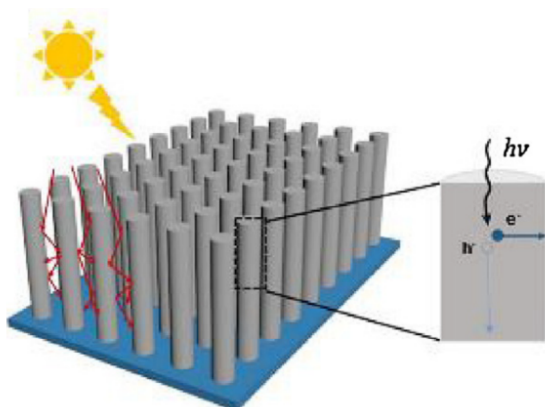
Кремний нанокұрылымдарын алу және олардың қасиеттерін зерттеу заманауи материалтану ғылымының бір үлкен және ерекше орын алатын саласы деп танылуда. Негізінен кремний нанокұрылымдарын морфологиясы мен өлшемдердің кеңістіктегі кішірею бағыттарына қарай сәйкесінше бір (1D), екі (2D) және үш өлшемді (3D) деп бөлеміз. 1D нанокұрылымдарына кремний наноталшықтары, 2D нанокұрылымдарына кремний нанокеуекті кремний моно- және мультиқабатты құрылымдыры және 3D нанокұрылымдарына кремний кванттық нүктелері мен нанобөлшектері жатады. Жарық ынталандырған реакцияларды катализдеуші ретінде қолдануға ұсынылып отырған фотосезгіш кремний нанокұрылымдарының негізгі түрлеріне қысқаша тоқталып өтейік.

2.1 Кремний наноталшықтары

Көлемді кристалдық кремниймен салыстырғанда бір өлшемді (1D) нанокұрылымда-

рының бұл түрі өзінің айтарлықтай зор беттік ауданыны мен кванттық шектеу салдарынан туындайтын эффектілерінің әсерінен өте жақсы электронды, оптикалық және химиялық қасиеттерді көрсетеді. Атап айтқанда, 1D жартылай өткізгіштік нанокұрылымдар күн энергиясын түрлендірудегі қолайлы конфигурация болып табылады, өйткені олардың көмегімен жақсартылған жарықтың антишағылуын, кең жолақты жұтылуын және заряд тасымалдаушыларын жетілдірілген жинақтауын жүзеге асыруға болады. 1D нанокұрылымдар күн сәулесі ынталандырған каталитикалық қолданыстардың жалпы тиімділігін арттыра алатын келесідей екі маңызды қасиетін ұсына алады: реакциялар жүретін кең беттік аудан және заряд тасымалдауды тежемейтін төмен электр кедергісін [10,11]. Осы себепті, 1D құрылымды кремний наноталшықтары (КНТ) құрылымдары жарық каталитикалық қолданыстар үшін маңызды және көз тартымды материал болып табылады.

1D құрылымды наноталшықтар кеңістікте біркелкі емес таралған жағдайда материал бетіне түскен жарықтың шашырауын айтарлықтай күшейте алмайды [12] және керісінше, мұндай құрылымды құрайтын талшықтар біртекті тәртіппен орналасқан болса (яғни вертикаль бағытталған массивтер түрінде кездессе), материал жарықты оқшаулайтын қасиеттерге ие болады. Әдетте, КНТ массивтері, бетіне түсірілген жарықты эффективті оқшаулаушы материал ретінде танылуда. Жарықтың оқшаулану дәрежесі 1D КНТ құрылымдарының ерекшеліктеріне байланысты [13]. Жарық тігінен бағытталған массивтерге кіргенде, құрылымдардың ені мен биіктігінің арасындағы қатынастың мәні жоғары болғандықтан бірнеше рет шашырауға ұшырайды. Нәтижесінде, 1 суретте көрсетілгендей, жарықтың жұтылуын арттыратын сәуленің оптикалық жүру жолы тиімді түрде артады. Мысалы, Янг және әріптестері [14] КНТ массивтері фотондық кристал сықылды құрылым бола тұрып, бетіне түсірілетін жарықтың оптикалық жүру жолын 73 есе ұлғайлатінін көрсеткен. Кремний нанокұрылымдарының биіктігі мен диаметрінің өзгеруі құрылымның сыну көрсеткіші мен оптикалық ұзындығына әсерін тигізіп, нәтижесінде түрленбелі анти-шағылдырғыш қасиеттердің пайда болуына келтіреді [15]. Сол себепті, жарықты жұту қабілеті жоғары КНТ массивтері күн энергиясын түрлендіруде қолайлы қара материалдарға жатқызылуда.



1-сурет – Фотоэлектрохимиялық жүйеде қолданылатын кремний наноталшықтары массивтеріндегі жарықтың оқшаулану құбылысының сызбалық бейнесі [16]

Сонымен қатар, КНТ массивтері негізгі емес заряд тасымалдаушыларының генерациясы, жинақталуы және ажырытылуында қолданылуы мүмкін. Түсуші фотондар КНТ массивтерінде жұтылатындықтан, негізгі емес заряд тасымалдаушылары наноталшықтардың бойында пайда болып, олардың миграциясы КНТ радиусының бағытындағы қысқа қашықтыққа жүзеге асырылады [17]. Осылайша, КНТ күн сәулесі ынталандырған катализ үшін заряд тасымалдаушыларын сақтауға мүмкіндік беретін, жүру жолының ұзындығы өте қысқа болатын тасымалдаушыларын шығаруда артықшылығы айқын деп айтуға болады [18].

КНТ құрылымдарының түзілуінде жеке алған талшықтың диаметрі критикалық параметр болып табылады. КНТ-дың радиусы бірнеше нанометрге (нм) немесе ангстремге (Å) қарай шегініп, экситонның Бор радиусына жақындағанда наноматериалда кванттық шектеу эффектілері айқындала түседі [19]. Заряд тасымалдаушыларының екі бағыттағы кванттық шектелуі Si құрылымының тыйым салынған аймағының кеңеюіне әкеледі. Мұны дәлелдейтін фактілерінің бірі ретінде КНТ құрылымдарының бөлме температурасы жағдайында бақыланатын фотолюминесценциясын атауға болады [20].

2.2 Кремний нанобөлшектері және нанокүрделері

Геометриялық ерекшеліктеріне байланысты квази-нөл (0D) өлшемді нанокұрылымдардың беттік ауданы 1D құрылымдарға қарағанда әлдеқайда үлкен болады. Сондықтан КНТ-на қарағанда кремний нанобөлшектерінің (КНБ) беттік қисықтануы мен ауданының көп есе үлкен болуы мұндай құрылымдардың тиімді

активті катализге қатысатын бетінің көбірек болуын қамтамасыз етеді [21]. КНТ-рын сипаттағанда айтылып кеткендей, КНБ-дегі заряд тасымалдаушыларының да еркін жүру ұзындығы үш бағытта да өте қысқа болады. Si нанобөлшектерінің диаметрі (4,5 нм) Бор экситонының радиусынан кіші болғандықтан кванттық шектеу эффектісінің әсерінен нанобөлшектерге қарағанда беттік ауданы үлкенрек болатын кванттық нүктелер (КН) деп аталатын құрылымдар түзіле бастайды [22].

Квази 0D нанокұрылымдардың тағы бір классын түрлі химиялық және физикалық әдістердің көмегімен алынатын, іші қуыс немесе кеуекті болып келетін құрылымдар құрайды. Кейбір әдебиеттерде мұндай құрылымдар кеуекті нанобөлшектер деп те аталады. Олардың беттік кедір-бұдырлығы мен кеуектілігіне байланысты беттік активті ауданы нанобөлшектерге қарағанда жоғары болады. Сонымен қатар, беттік ауданы үлкен және көптеген өзара байланысқан кеуектерден тұратын нанокұрылымдар негізгі емес тасымалдаушыларды жинақтау жолын қысқартып, кеңістіктік заряд қабатының көлемдік қатынасын арттырады [23]. Негізнен, фотогенерацияланған заряд тасымалдаушыларының тиімді жинақталуы сол тасымалдаушылардың жүретін қашықтығымен анықталатыны белгілі. Сондықтан, негізгі емес заряд тасымалдаушыларының диффузиясы арақашықтығының қысқа болуы осы тасымалдаушылардың рекомбинациясының ықтималдығын төмендетіп, зарядтың жинақталуын жеңілдетіп түсіруі мүмкін.

КН-лер мен кеуекті нанобөлшектердегі заряд тасымалдаушыларын көп-өлшемді кванттық шектеу эффектісі Si нанокұрылымдарының тыйым салынған аймағының ұлғаюына әкеледі. Кванттық шектеудің салдарынан нанобөлшектердің өлшемдері матриалдың энергиялық аймақтарының құрылымына тікелей әсер етіп, тыйым салынған аймағын өзгертіп отыруға мүмкіндік береді. Мысал үшін, [24] жұмысының авторлары көрсеткендей, диаметрлері 3–4 нм болатын Si КН-рінің тыйым салынған аймақтарының ені 1.5–2.2 эВ аралығында жатса, диаметрлері 1–2 нм болғандар үшін 2.3–3.5 эВ құраған.

Осындай үлкен белсенді беттік алаңы бар квази 0D нанокұрылымдардың көбісі катализдік реакцияларда пайдалану үшін тиімді болғанмен дамыған беттік морфология фотогенерацияланған заряд тасымалдаушыларын азайтатын көптеген ақаулардың да көзі болатынын ескеріп оты-

руымыз қажет. Көрінетін фотолюминесценцияны келтіретін заряд тасымалдаушыларының қарқынды рекомбинациясы олардың катализ реакцияларында қолдану тиімділігін айтарлықтай шектейді [25]. Алайда, құрылымдардың бетіндегі белсенді орталықтар санының көбеюі химиялық ортаның әсерінен беткі қабаттың пассивациясын (мысалы, беттік тотығу) жеңілдетуі мүмкін. Ал, өз кезегінде, белсенді орталықтар өзінің каталитикалық белсенділігін беткі пассивация кезінде жоғалтады. Осы себепті заряд тасымалдаушыларының рекомбинациясы мен беттік пассивацияны басу үшін беттік модификациялар және синергетикалық катализаторлар кеңінен қолданылуда.

Жалпы қарағанда, бөлшектердің өлшемдері, беттік құрылымы, кристаллетігі, морфология және энергетикалық аймақтарының құрылымы сақты көптеген параметрлер осындай 0D материалдардың күн сәулесі ынталандыратын каталитикалық қолданыстардағы тиімділігіне өз әсерін тигізуде. Мысалы, тыйым салынған аймақтардың ұлғаюы КНБ-ді тотығу-тотықсыздану реакциялар үшін қолайлы етсе [24], кеуекті құрылымның ішінде орын алатын мультишағылысу процесстері жарықты оқшаулауды күшейтеді. Денегмен, Si салыстырмалы түрде тұрақты материал болып саналғанымен, ашық қанықпаған байланыстар оның реактивтілігін күрт арттыруда. Тотықтырғыш ортада кремний бетінде жіңішке оксид қабатын қалыптастыру кезінде баяу тотығады. Si нанокұрылымдарының өлшемдері төмендеген сайын беттік ауданы ұлғая түскендіктен, олардың бетінде су және оттегі сияқты қоршаған химиялық заттармен тотығатын белсенді бөлшектер көп болады [26]. Беткі оксид қабаты нанокұрылымдар үшін біршама қорғаныш ролін атқара алағанымен, тотығу салдарынан пайда болған пассивация беткі қабаттың каталитикалық қолданыстардағы Si атомдарының белсенділігі төмендетеді.

Si нанокұрылымдарын қаптаған кремний оксиді қабатын жою үшін материалдардың беті фтор қышқылы (HF) ерітінділермен өңдеуге болады. Осындай қышқылдық өңдеуден кейін Si беті тұрақты Si-H байланыстарының арқасында сутегі-терминатталған болып шығады. Si нанокұрылымдарының бетінде Si-H байланыстарының түзілуі беттің едәуір тұрақты болуына ықпал етеді. Si нанокұрылымдарының беткі ауданы мен беткейлік қисықтығы жоғары болғандықтан, үзілген байланыстар беттік модификацияны күн сәулесінің қатысуымен жүретін катализ үшін неғұрлым маңызды

етеді. КНБ бетіндегі Si-H байланыстары күн жарығы ынталандырған катализдегі белсенді орталықтардың ролін әбден атқаруы мүмкін [27]. Мысалы, Ли және әріптестері [28] осындай сутек атомдары электрондық жетіспеушілікке тап болған соң электрондарды түсіретін ор ретінде жұмыс істеп, фотогенерацияланған электрон және кемтік жұптарын бөлуге қатысатыны туралы болжам жасады. Сонымен қатар, КНБ-нің сутегі-терминатталған беттері жалғасушы катализдік реакцияларды жүзеге асыру үшін керек -ОН радикалдар тобының әлдеқайда тиімдірек көзі болатыны жайлы [29] жұмысының авторлары хабарлаған. Сол себепті, сутегі-терминатталған топтары бар Si нанокұрылымдары жарық түскен кезде жақсартылған каталитикалық қасиеттерін көрсетеді.

3. Кремний нанокұрылымдарын алу әдістері

Технологиялық прогресстің арқасында функционалды наноматериалдарға деген өсіп келе жатқан сұраныты қанағаттандыру үшін, әртүрлі кремнийлі нанокұрылымдарды синтездеу мен өндірудің басқарылмалы әдістері соңғы жылдары белсенді дамытылуда. Бұл бөлім кремний нанокұрылымдарын синтездеу және алу әдістерін олардың морфология түрлеріне бөліп қарастыруға арналған.

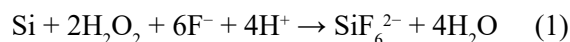
3.1 Кремний наноталшықтары

VLS әдісі. Жарық ынталандырған реакцияларды катализдеуші ретінде қолдануға ұсынылып отырған фотосезгіш КНТ құрылымдары негізінен «жоғарыдан-төмен» және «төменнен-жоғары» бағытта жүзеге асырылатын екі технологиялық тәсілмен синтезделеді. Аталған технологиялық тәсілдер кремний нанокұрылымдарын түзудің әр түрлі әдістерін ұсынуда. Мысалы «төменнен-жоғары» тәсілінің ең кеңінен таралған әдісі ретінде «бу-сұйық-қатты дене» (ағылш. VLS – vapour-liquid-solid) деген нанокұрылымдардың өсуі кезіндегі фазалық ауысулармен сипатталатын әдісін атауға болады [30]. КНТ-тардың VLS процессі кезіндегі түзілу механизмі келесі екі жағдайға негізделген: белгілі бір метал қоспалары КНТ құрылымдарының өсуіне түрткі жағдай тудырады және сол енгізілген метал қоспаларының глобулалары түзіліп келе жатқан талшықтардың төбесінде орналасады.

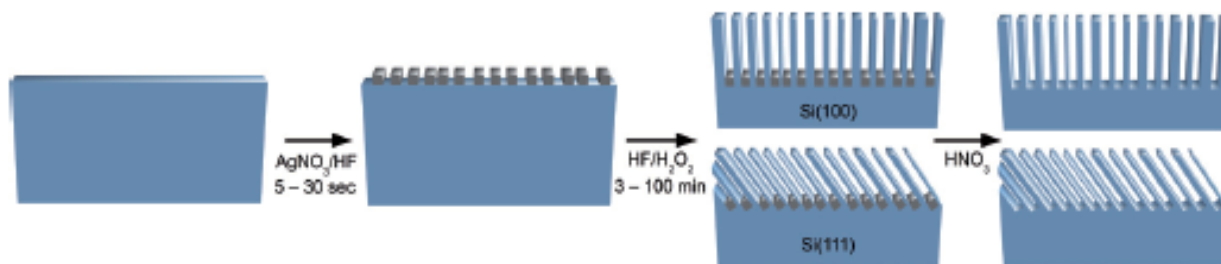
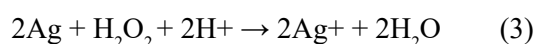
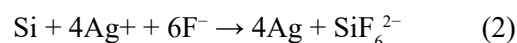
Метал енгізілген химиялық жеміру. «Жоғарыдан-төмен» әдістерінің ішінде метал енгізілген химиялық жеміру (МЕХЖ) әдісі зерттеуші қауымның ерекше қызығушылығын тудырып

отыр. МЕХЖ кремний нанокұрылымдарын алудың арзан, әрі қарапайым әдісі болып саналады. Мұның негізгі себебі МЕХЖ әдісінің арнайы қымбат вакуумдық құрылғыларды қолдануды талап етпейтіндігінде. МЕХЖ-дің жүзеге асырылу кезеңдері 2 суретте көрсетілген. МЕХЖ әдісі үш сатылы кезеңнен тұрады. Процесстің бастапқы кезеңінде күміс нитраты мен фтор қышқылы ерітіндісінен асыл металдың (күміс, алтын және мыс жиі қолданылады) нанобөлшектері жартылайөткізгіш төсеніштің бетіне отырғызылады. Асыл метал бөлшектері бұл ретте тотығу-тотықсыздану реакцияларының катализаторы рөлін атқарып, нанокұрылымдардың өсуіне ықпал етеді [31]. Сынды бірқатар жұмыстарда ең тиімді катализатор күміс болатындығы көрсетілген. МЕХЖ әдісі-

нің екінші кезеңінде наноталшықтардың жоғарыдан-төмен бағыттағы өсуі жүзеге асады. Бұл процесс сутегі асқын тотығы және фтор қышқылы қосылған ерітіндіде жүргізіледі. МЕХЖ процессінің механизмдерін сипаттайтын жалпы химиялық реакциясының теңдеуін келесі түрде келтіруге болады:



Күміс бөлшектері катализдейтін МЕХЖ процессі келесі екі реакцияға негізделеді [32]:



2-сурет – МЕХЖ процесі сатыларының шарттық бейнесі. Әдіс төрт түрлі ерітіндіде жүргізіледі:

- 1) алдымен кремний пластинасының бетінен табиғи оксиды HF қосылған ерітіндіге батыру арқылы кетіріледі;
- 2) Ag нанобөлшектері тұндырылады; 3) Ag нанобөлшектері көмегімен кремнийдің каталитикалық жемірілуі жүзеге асып;
- 4) Ag нанобөлшектерін химиялық жолмен кетіріледі [33]

H_2O_2 және Si валенттік аймағының арасындағы потенциалдар айырмасы кремнийдің валенттік аймағына кемтіктердің инъекциясын жеңілдететкеннің нәтижесінде Si тотығады. Бұл жүйеде асыл металдар Si мен тотықтырғыш заттар арасындағы реакцияны тездететін катализаторлар ретінде әрекет етеді. Тотығу-тотықсыздану реакциялары жалғасқан кезде Ag нанобөлшектері жеміру шұңқырларының тереңіне төмен еніп, белгілі бір уақыт ішінде КНТ массивтері түзіледі. Реакция потенциалы Si-ді МЕХЖ-нің негізгі қозғаушы күші болғандықтан, бұл процесстің тиімділігі реагенттердің ерітіндідегі концентрациясына (яғни, AgNO_3 , H_2O_2 және HF), бастапқы кристалды Si пластинасының легирлеу деңгейі мен кристаллографиялық бағытына және реакция температурасына тікелей тәуелді. Қалыптасатын КНТ ұзындығы жеміру уақытына байланысты болғандықтан МЕХЖ әдісі қалыңдығы қажетті

нанокұрылымдырды алуды қамтамасыз ететін оңай, әрі тиімді жолы болып табылады.

Реактивті иондардық жеміру. Квази реттелген 1D құрылымды КНТ массивтерін алудың тағы бір әдісі – терең реактивті иондық жеміру (РИЖ). РИЖ Si микро-және нанокұрылымдарын химиялық реактивті плазманың көмегімен алу үшін арналған құрғақ жемірудің кеңінен таралған бір түрі [34]. Плазма төмен қысым жағдайында жоғары радиожиліктегі электромагниттік өріс тудырады. Өрістің белсендірілген радикалдары Si-мен газ тәрізді өнімдер түзуші реакцияларына түсуге қабілетті. Басқарылатын жағдайда жеміру физикалық иондық атқылау және химиялық реакциялардың қосарлана өтуінің арқасында жүзеге асырылады. РИЖ-дің нәтижесінде керекті схемалар белгілі бір үлгісі бар маскалардан (фоторезист, метал, силикон және т.б.) Si пластинасының бетіне тиімді түрде тасымалданады [35]. Егер маскада келтірілген

үлгі реттелген дөңгелек массивтер түрінде болса, қалыптасқан Si құрылымдары вертикаль реттелген талшық тәрізді болып түзіледі. Дегенмен, РИЖ әдісінің кейбір кемшіліктері де бар. Олардың бірі – РИЖ кезінде көлденең бағытталған жеміру градиентті түрде ұлғайып тұруы тиістілігі. Нәтижесінде қалыптасқан КНТ массивтері жоспарланған құрылымдардан әлдеқайда ерекше болып шығуы мүмкін. Осындай қиыншылықтар туындаған соң, РИЖ әдісі кең ауқымды қолданыстарға арналған құрылымдарды алу үшін сирек қолданылады.

3.2 Кремний нанобөлшектері

Шарлы диірмендердегі үгіту. Бастапқы материалды шарлы диірмендердің көмегімен үгіту нанобөлшектерді ешбір химиялық реакцияның қатысуынсыз алудың ең қарапайым әдісі болып табылады. Бұл әдіс өлшемдері мен морфологиясы әртүрлі болатын КНБ құрылымдарын алу үшін қолданылуы мүмкін. Әдетте, КНБ-рін алу үшін Si тазартылып шарлы диірменнің ұнтақтау камерасына салынады. Материал қаттылығы жоғары материалдардан жасалатын шарлардың көмегімен жоғары жылдамдықтағы айналдыру арқылы үгітіледі. Фильтрациядан кейін диаметрлері бірнеше нм болатын КНБ алуынуы мүмкін [36].

Жылулық емес плазма әдісі. Жылулық емес плазмалық синтезінің барысында жоғары кристалдану энергиясының қамтамасыз етілуі бұл технологияны IV топ элементтерінің нанобөлшектерін алу үшін өте қолайлы әдіс етті [37, 38]. КНБ-рі ағынды түтік реакторының ішінде қоздырылған плазманың қатысуымен синтезделеді. Бұл жүйеде шикізат газы ретінде SiH_4 немесе SiCl_4 қолданылып, He және Ar тасымалдаушы газы, әрі түзілген нанобөлшектерді төсеніш бетіне отырғызушы агент ретінде пайдалануда. Аталмыш әдістің көмегімен алынған нанобөлшектердің пішіні куб тәрізді болып шығады [39]. Мұндай газ фазалы жүйелер КНБ-ріне оңайлықпен қоспа енгізу және өлшемдерін бірнеше бірлік нанометрден бірнеше ондаған нанометрге дейін өзгерту мүмкіндігін қамтамасыз етеді.

Жылулық қалпына келтіру. SiO – бұл құрамында өте кішкентай ангстрем (Å) өлшемді аморфты Si және аморфты SiO_2 кластерлері бар қосылыс. Бөлім шекарасындағы Si субтогығының аудандарының валенттілігі 1-ден 4-ке дейін өзгеріп отыратын айнымалы шама болып табылады. Осылайша SiO ұнтағының сутекті жоғары температурлық қалпына келтіру арқылы КНБ-терін синтездеу үшін шикізат көзі ретінде

қолданылуының мүмкіндігі айқындалуда. Қызған кезде аморфты Si кристалданып, пайда болған субтогықтың диспропорциясының нәтижесінде өседі [40]. Алайда, кремний тотығы мен силикаттар тотық күйіндегі жиірек кездесетін шикізат болып табылады. Оларды кремнийдің $1700\text{ }^\circ\text{C}$ температурасындағы карботермиялық қалпына келтіру және $650\text{ }^\circ\text{C}$ жоғары алюмотермиялық/магнитотермиялық реакциялар сияқты жоғары температуралы термиялық қалпына келтіру процестерінде Si негізіндегі материалдарды алу үшін пайдалануға болады.

3.3 Кремний нанонүктелері

Электрохимиялық жеміру. Кремнийді электрохимиялық жеміру оны гальваникалық коррозияға ұшырату арқылы өлшемдері айнымалы Si КН-рін алу үшін мүмкіндік береді. Әдеттегі тәжірибе катод ретінде кремний төсеніштерін пайдаланатын электрохимиялық ұяшықта жүзеге асырылады. Тотықтырушы электролиттің құрамына этанол, HF және H_2O_2 кіреді. Si КН-рінің морфологиялары ұяшыққа берілетін тоқ тығыздығымен реттеледі. Мәселен, тоқ тығыздығының жоғары мәндері өлшемдері кішкентай Si КН-рінің түзілуіне әкеледі. Ал жоғарыдисперті Si КН-рін синтездеу полиоксометаллаттарды қосу арқылы жүзеге асады [24].

Жылулық емес плазма әдісі. Жоғарыда айтылып кеткендей, жылулық емес плазма әдісін оның синтездеу жағдайларын реттеу арқылы КНБ-терін синтездеу үшін де қолдануға болады. Синтезделуші КНБ-терінің өлшемдері бірнеше нанометрге дейін реттелетін болатындықтан және оларда кванттық шектеу эффектілері жүзеге аса бастағандықтан нанобөлшектер нанонүктелер ретінде қарастырылуы мүмкін. КНБ-дің өлшемдері екі эффектінің көмегімен реттеледі: 1) SiH_4 радикалдарының тез таралуына әкелетін плазманың кейінгі жарықына жеңіл газдарды енгізу, және 2) құрылымдардың бетіндегі Si гидридінің бөлшектерін аздап жеміруді тудырады гелийдің орнына сутекті қолдану [41].

Микротолқындық әдіс. Температураның тез көтерілуіне, қыздырудың біркелкілігіне және КНБ-дің түзілуі реакциясының жоғары селективтілігіне байланысты микротолқындық қыздыру зерттеушілердің қалаулы әдістерінің бірі болып табылады. Келесі [42] жұмыстың авторлары кремний нанонүктелерін алу үшін синтезде КНТ мен глютар қышқылын микротолқынды қыздыру кезіндегі прекурсорлар ретінде қолданатын тез, әрі бір көлемде жүзеге асатын әдісін сипаттап шыққан. Si нанокұрылымдарын прекурсорлар ретінде

қолданудың қажеттілігі бұл әдістің кемшілігі болып табылады. Дегенмен, КНН-нің өлшемдерін бақылау жүйедегі қыздыру қуатын реттеу арқылы қол жеткізуге болады.

Коллоидты синтез. КНН-лерін синтездеудің ең көп таралған әдісі ретінде SiCl_4 немесе SiBr_4 қосылыстарын прекурсорлар ретінде қолданылатын ерітінді-фазалық жүйені атауға болады. Суда еритін КНН беттік белсенді заттармен немесе жабатын заттармен тотықсыздандырғыштардың көмегімен араластыру кезінде инертті атмосферада оңай синтезделуі мүмкін. Алайда, әдетте коллоидты синтездің нәтижесінде түзілген КНН-дің бетін үзілген байланыстар (мысалы, сутегілік) қаптап тұрады. КНН-лердің бетінің жағдайын бақылау үшін оның коллоидты беттік реакциялар арқылы арнайы лигандаларды қолданып модификациясын жүзеге асыруға болады [43].

4. Кремний нанокұрылымдарын фотока- тализдік процестерде қолдану

Әдебиеттерде кремний нанокұрылымдарын пайдалана отырып сутегін генерациялаудың себеп болатын екі түрлі механизмі қарастырылады. Бірінші механизм нанокұрылымдардың тұрақты кремний диоксидіне дейін толық тотығуымен байланысты. Нанокұрылымдардың өлшемдері азайған сайын олардың тотығуының реакциясы белсендірек жүреді. Реакцияны сілті қосу арқылы тездетуге болады. Бұл процесс жақсы зерттелінген және кіші диаметрлі кеуекті нанобөлшектер көмегімен сутегін генерациялау үшін табысты қолданылады [44].

Кремний нанокұрылымдарын пайдалана отырып сутегінің бөлінуін түсіндіретін екінші механизм су молекулаларының фотокализдік ыдырауы болып табылады. Бірқатар жұмыста зерттеушілер кремний нанокұрылымдарының бетіне жарық түсірілген кезінде судың ыдырап, газдың бөлініп шығу процесстері жүзеге асатындығын көрсетті.

Өзіндік кремнийдің шамамен 1,1 эВ құрайтын тыйым салынған аймағының ені материалға күн сәулесінің кең спектріндегі жарықты жұту мүмкіндігін береді. Si материалдарын нанокұрылымдарға түрлендіру арқылы олардың жарық жұту қабілетін одан әрі күшейтуге болады. Жартылайөткізгіш нанокұрылымдардың бетіне түсірілген жарықтың энергиясы материалдың тыйым салынған аймағының еніне тең немесе одан артық болса фотокоздырылған электрондар мен кемтіктер пайда болуы мүмкін.

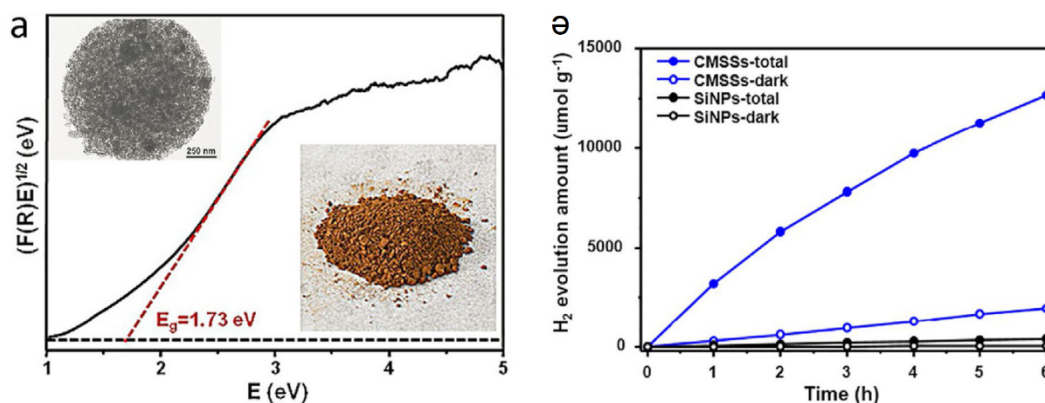
Бұл фотогенерацияланған тасымалдаушылар тотығу реакцияларына тікелей қатыса алады. Бұл жағдайда валенттілік және өткізгіштік аймақтарының энергетикалық деңгейлері тотығу-тотықсыздану потенциалына сәйкес болып тұрса, реакция энергиясы химиялық байланыс түзу арқылы химиялық энергия түрінде жиналады [45].

Су молекулаларының тура ыдыратуын жүзеге асыру үшін жартылайөткізгіштің өткізгіштік аймағының минимум деңгейі H^+/H_2 тотығу-тотықсыздану жұбының тотықсыздану потенциалынан әлдеқайда теріс (электродтың қалыпты стандарты (NHE) қатысты 0В), ал валентті аймағының максимум деңгейі жұбының $\text{O}_2/\text{H}_2\text{O}$ тотығу потенциалынан төмен болуы тиіс (NHE қатысты 1.23 В). Жалғыз Si бір мезгілде суды сутегі мен оттегіне бөліп ажыратудың қажеттіліктігін қанағаттандыра алмайтындықтан судың ыдырау потенциалдарын рН деңгейін өзгерту арқылы реттеу қолданылады. Si нанокұрылымдары электролиттермен немесе басқа катализаторлармен әрекеттесіп бастағанда, олардың Ферми деңгейлерін теңестіретін энергетикалық аймақтардың иілісі пайда болады, бұл Si-де фотокоздырылған тасымалдаушылардың тотығу-тотықсыздану қабілетін өзгерту үшін қажет. Алайда, беттік модификация Si нанокұрылымдарында әр түрлі беттік күйлерді келтірудің тиімді әдісі болып табылады [46].

Тікелей фотокализ өткізгіш төсенішті қажет етпейтін және сыртқы кернеуді қолданбай суды ыдырату арқылы сутекті генерациялаудың қарапайым және арзан әдісі деп танылады [27]. Si нанокұрылымдарына негізделген фотокализаторлары бетінің үлкен аумағымен, белсенді учаскелерінің ауқымдылығымен және тасымалдаушылардың жүру қашықтықтарының қысқалығымен ерекшеленеді. Әдетте, тыйым салынған аймағы тура емес болатын кристалды кремнийдің жарықты жұту коэффициенті көрінетін оптикалық аймағында жоғары мәндерге ие болмайды. Бұл шектеуден шығу үшін жарықты жұту тиімділігін арттыру мақсатында Si материалдарын кеуекті құрылымды етуге болады. Мысалы, Ванг және әріптестері мезокеуекті Si нанокұрылымдарында пайда болатын кванттық шектеу эффектісінің арқасында кремнийдің тыйымсалынған аймағын 1.33–1.90 эВ дейін кеңейтіп, сутегі генерациясын жеңілдетуге болатынын көрсетті [47]. Кеуекті Si нанокұрылымдарыда заряд тасымалдаушылардың жүру қашықтығы қысқа және олардың қозғалғыштығы жоғары болғандықтан, материалдағы фотокоздырылған

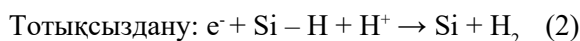
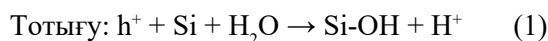
электрондар тұтынылатын агенттердің қатысуымен суды қалпына келтіруге тиімді қатыса алады. Осылайша, Сонг және әріптестері беттік ауданы $337 \text{ м}^2\text{г}^{-1}$ болатын мезокеуекті Si нанос-

фераларын қолдана отырып, тәжірибе жүзінде H_2 бөлініп шығу жылдамдығын $1785 \text{ ммоль}^{-1}\text{г}^{-1}$ дейін жеткізуге болатындығын көрсетті (3а 3ә және суреттері) [48].

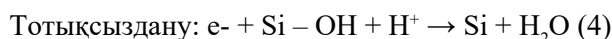
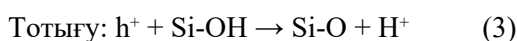


3-сурет – (а) Таук графигінің көмегімен анықталған мезокеуекті Si наносфералардың тыйым салынған аймақтары. Суреттегі келтірілген ішкі кескіндерде Si наносфералардың ЖЭМ бейнесі мен фото кескіні көрсетілген. (ә) Көрінетін H_2 фотокаталикалық эволюциясының реакция уақыты [48]

HF қышқылымен өңдеу жүргізілгеннен кейін Si нанокұрылымдарының бетінде көптеген Si-H байланыстарының пайда болуы заряд тасымалдаушылары рекомбинациясының жылдамдығын баяулатып, зарядтардың бөлінуін жеңілдетеді. Лиу және әріптестері [27] кремний наноталшықтарының фотокаталикалық қабілетін зерттеп, құрылымдардың бетінде газ тәрізді H_2 пайда болуы Si-H байланыстарының үзілуі мен Si-OH байланыстарының түзілуі арқылы жүзеге асатындығын көрсеткен (4 сурет). Сутегінің бөлініп шығу процесстері келесідей реакциялардың теңдеулерімен сипатталады:

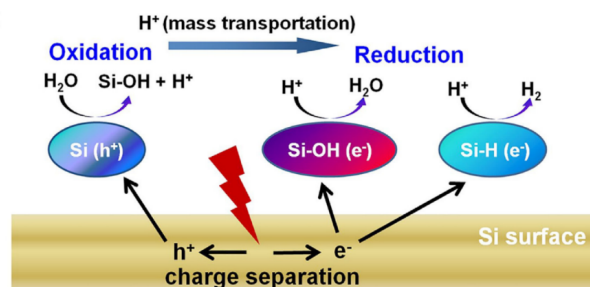


O_2 генерациясы реакциясы:



Осылайша, судың фотокатализдік ыдырауы Si-H байланыстарының үзілуі және Si-OH байланыстарының түзілуімен жалғасып, нәтижесінде бөлініп шығатын H_2/O_2 газдарының мөлшерінің қатынасы 2 көп болуы мүмкін. Аталған процесстерде үзілген Si-H байланыстары заряд тасымалдаушыларының ажыратылуы

мен олардың өмір сүру уақытын ұзартуда ең маңызды рөл атқарады. Осылайша, беттік химия кремний нанокұрылымдарының каталикалық сипаттамаларын түрлендірудің әмбебап құралы болып табылатынына көз жеткізуге болады.



4-сурет – Кремний бетіндегі сутегінің фотокаталикалық генерациясы реакцияларының жалпы механизмдері [27]

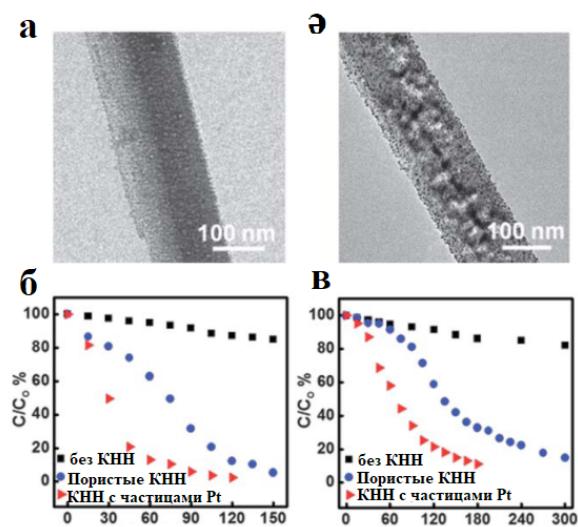
Судың толық фотокатализдік ыдырауына қол жеткізу үшін катализатор ретінде Si нанокұрылымдарын әртүрлі материалдармен біріктіріп алынатын гетероауысымды құрылымдарды қолдану ұсынылған. Мысалы, Янг және әріптестері [49] жасанды фотосинтезді жүзеге асыру мақсатында КНТ және TiO_2 интеграциясы арқасында алынған зигзаг пішінді құрылымдар жайлы жазған. Зерттеушілер мұндай құрылымдарға Pt және IrO_x нанобөлшектерін қосып отырып фотокатализдік реакцияларында пайдаланған кезде сутегі генерациясының

тиімділігін 0,12% жеткізген. Si негізіндегі гетероауысымды құрылымдардың екінші бір типтік конфигурациясы ретінде ядросы мен сыртқы қабаты бар (ағылш. core-shell) құрылымды атауға болады. Мұндай құрылымдар КНТ негізіндегі күн элементтерінің жобаларында жиі кездеседі [10]. Ядросы ретінде КНТ қолданылатын core-shell құрылымдары фотокализдік реакциялар үшін өте тиімді екенін [50] жұмысының авторлары көрсеткен. Осындай Si нанокұрылымдарына негізделіп біріктірілген наножүйелердің басқа материалдарға қарағандағы артықшылықтары ретінде олардың энергиялық аймақтарын бағытталған реттеу арқылы пайда болатын заряд тасымалдаушыларының тез ажыратылуы мен тасымалдануын атасақ болады.

Фотокатализдік реакциялар тек молекулалық сутегін бөліп шығару үшін ғана емес басқа да қолданыстарға ие. Мысалы, көбінесе бояу молекулаларын ыдырату реакциясы жартылайөткізгіш материалдардың фотокатализдік белсенділігін тексеру үшін қолданылады. Жарықты жұту және оның энергиясын түрлендірудегі жоғары белсенділікке ие болатын Si нанокұрылымдары бояғыш молекулаларының деградациясында да басты рөл атқара алатынында күмән жоқ. Оған молекулалық сутегінің генерациялану эффективтілігін жоғарылату және бояғыш затты ыдырату мақсатында Si нанокұрылымдарын модификациясын жүзеге асырудың тағы бір мысалы ретінде Калифорниялық зерттеушілер тобының жұмысын келтірсек болады. Олар КНТ-рының фотокатализдік белсенділігін күшейту үшін оларға диаметрі 3-4 нм Pt нанобөлшектерін енгізген және синтездеген нанокұрылымдардың индигокармин (сурет 5б) мен 4-нитрофенолды (сурет 5в) бояғыш заттарының фотокатализдік ыдырау реакцияларының белсенділігіне тигізетін әсерін зерттеген (негізгі нәтижелері 5 суретте келтірілген) [47]. Нәтижесінде 60-минуттық сәулелендіруден кейін кеуекті КНТ (сурет 5 а) және Pt нанобөлшектері бар КНТ қосылған ерітінділердегі индигокарминнің сәйкесінше 37,2% және 86,9% ыдыраған, ал фотокатализаторлар қатысуынсыз бояғыш молекулалардың 4,7% ғана диссоциацияланған (сурет 5в). Осылайша метал нанобөлшектерін енгізу арқылы кеуекті кремний нанокұрылымдарының фотокатализдік эффективтілігін тәжірибелік түрде арттыру мүмкіндігі көрсетілді.

Екінші бір мысал ретінде Ли және әріптестері сипаттаған тәжірибенің нәтижелерін атасақ болады. Қызыл метилды фотокатализдік тиімді

ыдырату үшін зерттеушілер диаметрі 1–2 нм болатын Si кванттық нүктелерін катализатор ретінде қолданған [24]. Жарық ынталандырған басқа да қолданыстар сияқты, бояудың фотокатализдік деградациясының тиімділігі Si наноматериалдарының беттік күйіне және құрылымына байланысты. Әдетте, сутегі атомдарымен қапталған Si нанокұрылымдары бояғыш заттарды ыдырату процессінде өзін тиімділігі жоғары катализатор ретінде көрсетуде. Бұл жағдайда Si-H байланыстарының сутегі атомдары электрон-кемтік жұптарын ажыратуды үдететін орталықтар ретінде әрекет етіп, Si-OH байланыстарының түзілуіне ықпал етеді [51]. Оған қоса айта кететін жай: Si нанокұрылымдарының легирлеу типі, легирлеу деңгейі, кеуектерінің пішіндері мен құрылымы және кристалдың бағыты бояғыш заттардың диссоциациясына үлкен әсерін тигізуде [52]. Бояғыш заттардың фотокатализдік ыдырауы кезінде қолданылатын Si нанокұрылымдарының ауқымды беттік ауданы мен орын алатын кванттық шектеу эффективтісі реакцияның белсенділігіне жағымды ісерін тигізеді. Осындай белсенді әрі тиімді Si нанокұрылымдарының негізіндегі фотокатализаторларын метал енгізілген химиялық жеміру әдісімен арзан металлургиялық сападағы шикізаттан да алып дайындауға болады [53].



5-сурет – (а) Кеуекті КНТ-ның ПЭМ бейнесі;

(б) Pt бөлшектері бар кеуекті КНТ-ның ПЭМ бейнесі;

(в) индигокармин деградациясының кинетикалары;

(а) фотокатализаторсыз және КНТ мен Pt бөлшектері бар КНТ қатысуымен 4-нитрофенолдың деградациясының кинетикалары [47]

Қорытынды

Қол жетімді әрі арзан технологияларды шығару және дамыту қазіргі таңдағы фотокаталитикалық материалтанудың дамуындағы негізгі бағыт болып саналады. Бұл тұрғыдан қарағанда заманауи зерттеулердің нәтижесінде жоғары фотокаталитикалық белсенділікті көрсеткен кремний нанокұрылымдары өте тиімді, болашағы зор материал болып есептеледі. Келтірілген әдеби шолуда фотокаталитикалық реакцияларының үдеткіші ретінде қолданылатын геометриялары әртүрлі болып шығатын кремний наноматериалдарын алу және синтездеудің әртүрлі әдістері сипатталынған және жарық ынталандырған сутегі генерациясының процесстерінде қолданудың нәтижелері талқыланылған. Берілген ақпараттардың нәтижесінде кремний нанокұрылымдары және олардың негізінде алы-

натын композитты біріктірілген материалдар тәжірибе жүзінде тиімділігі жоғары жартылайкізгіштік фотокаталитизатор екеніне көз жеткіздік. Кремний нанокұрылымды күн сәулесі жарығы ынталандырған су молекулаларын диссоциациялау процесстеріне қатыстырып молекулярлы сутегін алу, сонымен қатар түрлі органикалық бояу немесе ластағыш молекулаларын фотокализдік ыдырату мақсатында қолданылатыны айтылды. Алайда, кремний нанокұрылымдарын жарық ынталандырған катализ процесстерінде өндірістік деңгейде қолдану әлі енгізілмеген, оның себебі – реакция механизмдері әлі толығымен зерттелінбеген және ашық сұрақтар әлі көп. Дегенмен, келтірілген әдебиеттерге сүйене отырып, кремний нанокұрылымдарының фотокаталитизатор ретінде қолдану мүмкіншілігінің болашағы өте зор деген қорытынды жасаймыз.

Әдебиеттер

- 1 Parra D., Valverde L., Pino F.J., Patela M.K. A review on the role, cost and value of hydrogen energy systems for deep decarbonisation // *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. -2019, -Vol.101. –Pp. 279-294.
- 2 Ismail A.A., Bahnemann D.W. Photochemical splitting of water for hydrogen production by photocatalysis: A review // *Solar Energy Materials and Solar Cells*. -2014, -Vol. 128. -Pp. 85-101.
- 3 Ермұхамед Д., Мұсабек Г.Қ., Диханбаев К.К., Байғанатова Ш.Б., Сиваков В.А. Жартылайөткізгіштік материалдар негізіндегі фотокатализ процесстерін зерттеу мен қолдануға қатысты заманауи жетістіктер. *Известия НАН РК, серия Химия и технологии*, -2017, -№4(424), -С. 26-38.
- 4 Hashimoto K., Irie H., Fujishima A. TiO₂ photocatalysis: a historical overview and future prospects // *Japanese Journal of Applied Physics*. -2005, -Vol.44 (12). –Pp.8269-8285. DOI: 10.1143/JJAP.44.8269
- 5 Chen X., Shen S., Guo L.S., Mao S. Semiconductor-based photocatalytic hydrogen generation // *Chem. Rev.* -2010, -Vol.110. -Pp. 6503–6570.
- 6 Moriya Y., Takatab T., Domen K. Recent progress in the development of (oxy) nitride photocatalysts for water splitting under visible-light irradiation // *Coord. Chem. Rev.* – 2013. –Vol. 257. –Pp. 1957–1969.
- 7 Ji J., Zhang H., Qui Y., Wang Y., Luo Y., Hu L. Platinum nanoparticle decorated silicon nanowire arrays for photoelectrochemical hydrogen production // *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*. -2013. -Vol. 24. -Pp. 4433-4438.
- 8 Mussabek G.K., Assilbayeva R.B., Yermukhamed D., Yar-Mukhamedova G.Sh. Timoshenko V.Yu. Features of total optical reflection in silicon nanostructures obtained by metal assisted chemical etching // *Proceedings of 17-th SGEM 2017, 29 June-5 July 2017, Albena, Bulgaria*. -2017, -Vol.17. Nano, bio, green and space technologies for sustainable future. Issue 61, Pp. 141- 147.
- 9 Bludau W., Onton A., Heinke W. Temperature dependence of the band gap of silicon // *J. Appl. Phys.* – 1974, -Vol. 45. –Pp. 1846–1848.
- 10 Peng K.Q., Wang X., Li L., Hu Y., Lee S.T. Silicon nanowires for advanced energy conversion and storage // *Nano Today*. -2013, -Vol. 8. –Pp. 75–97.
- 11 Hochbaum A.I., Yang P. Semiconductor nanowires for energy conversion // *Chem. Rev.* -2010, -Vol. 110. –Pp. 527–546.
- 12 Broenstrup G., Jahr N., Leiterer C., Csaki A., Fritzsche W., Christiansen S. Optical properties of individual silicon nanowires for photonic devices // *ACS Nano*. -2010. –Vol. 4. –Pp. 7113–7122.
- 13 Boettcher S.W., Spurgeon J.M., Putnam M.C., Warren E.L., Turner-Evans D.B., Kelzenberg M.D., Maiolo J.R., Atwater H.A., Lewis N.S. Energy-conversion properties of vapor-liquid-solid-grown silicon wire-array photocathodes // *Science*. -2010. –Vol. 327. –Pp. 185–187.
- 14 Garnett E., Yang P. Light trapping in silicon nanowire solar cells // *Nano Lett.* -2010. –Vol. 10. –Pp. 1082–1087.
- 15 Huang Y.-F., Chattopadhyay S., Jen Y.-J., Peng C.-Y., Liu T.-A., Hsu Y.-K., Pan C.-L., Lo H.-C., Hsu C.-H., Chang Y.-H., Lee C.-S., Chen K.-H., Chen L.-C. Improved broadband and quasi-omnidirectional anti-reflection properties with biomimetic silicon nanostructures // *Nat. Nanotechnol.* -2007. –Vol.2. –Pp. 770–774.
- 16 Kelzenberg M.D., Boettcher S.W., Petykiewicz J.A., Turner-Evans D.B., Putnam M.C., Warren E.L., Spurgeon J.M., Briggs R.M., Lewis N.S., Atwater H.A. Enhanced absorption and carrier collection in Si wire arrays for photovoltaic applications // *Nat. Mater.* -2010. –Vol.9. –Pp. 239–244.

- 17 Oh I., Kye J., Hwang S. Enhanced photoelectrochemical hydrogen production from silicon nanowire array photocathode // *Nano Lett.* -2012. –Vol.12. –Pp. 298–302.
- 18 Priolo F., Gregorkiewicz T., Galli M., Krauss T.F. Silicon nanostructures for photonics and photovoltaics // *Nat. Nanotechnol.* -2014. –Vol. 9. –Pp. 19–32.
- 19 Delley B., Steigmeier E.F. Size dependence of band gaps in silicon nanostructures // *Appl. Phys. Lett.* -1995. –Vol. 67. –Pp.2370–2372.
- 20 Nolan M., O’Callaghan S., Fagas G., Greer J.C., Frauenheim T. Silicon nanowire band gap modification // *Nano Lett.* -2007. –Vol. 7.-Pp. 34–38.
- 21 Sun W., Qian C., He L., Ghuman K.K., Wong A.P., Jia J., Jelle A.A., O’Brien P.G., Reyes L.M., Wood T.E., Helmy A.S., Mims C.A., Singh C.V., Ozin G.A. Heterogeneous reduction of carbon dioxide by hydride-terminated silicon nanocrystals // *Nat. Commun.* -2016. –Vol.7. – Pp. 12553.
- 22 McVey B.F.P., Tilley R.D. Solution synthesis, optical properties, and bioimaging applications of silicon nanocrystals // *Acc. Chem. Res.* -2014. –Vol. 47. –Pp. 3045–3051.
- 23 Li Z., Feng J., Yan S., Zou Z. Solar fuel production: Strategies and new opportunities with nanostructures // *Nano Today.* -2015. –Vol. 10. –Pp.468–486.
- 24 Kang Z., Tsang C.H.A., Wong N.B., Zhang Z., Lee S.T. Silicon quantum dots: A general photocatalyst for reduction, decomposition, and selective oxidation reactions // *J. Am. Chem. Soc.* -2007. –Vol.12. –Pp. 12090–12091.
- 25 Lapkin A.A., Boddu V.M., Aliev G.N., Goller B., Polisski S., Kovalev D. Photo-oxidation by singlet oxygen generated on nanoporous silicon in a LED-powered reactor // *Chem.Eng. J.* -2008. –Vol. 136. –Pp. 331–336.
- 26 Wheeler L.M., Neale N.R., Chen T., Kortshagen U.R. Hypervalent surface interactions for colloidal stability and doping of silicon nanocrystals // *Nat. Commun.* -2013. –Vol. 4. –P. 2197.
- 27 Liu D., Li L., Gao Y., Wang C., Jiang J., Xiong Y. The nature of photocatalytic "water splitting" on silicon nanowires // *Angew. Chem. Int. Ed.* -2015. –Vol.54. –Pp. 2980–2985.
- 28 Shao M., Cheng L., Zhang X., Ma D.D.D., Lee S.T. Excellent photocatalysis of HF-treated silicon nanowires // *J. Am. Chem. Soc.* -2009. –Vol.131. –Pp.17738–17739.
- 29 Wang F.Y., Yang Q.D., Xu G., Lei N.Y., Tsang Y.K., Wong N.B., Ho J.C. Highly active and enhanced photocatalytic silicon nanowire arrays // *Nanoscale.* -2011. –Vol. 3. –Pp. 3269–3276.
- 30 Schmidt V., Witemann J. V., Senz., Gösele U. Silicon nanowires: a review on aspects of their growth and their electrical properties // *Adv. Mater.* -2009, -Vol. 21. –Pp. 2681–2702.
- 31 Han H., Huang Z., Lee W. Metal-assisted chemical etching of silicon and nanotechnology applications // *Nano Today.* -2014. –Vol. 9. –Pp. 271–304.
- 32 Zhang M.L., Peng K.Q., Fan X., Jie J.S., Zhang R.Q., Lee S.T., Wong N.B. Preparation of large-area uniform silicon nanowires arrays through metal-assisted chemical etching // *J. Phys. Chem. C.* -2008. –Vol. 112. –Pp. 4444–4450.
- 33 Hoffmann B., Sivakov V., Schmitt S.W., Bashouti M.Y., Latzel M., Dluhoš J., Jiruse J., Christiansen S. Wet – chemically etched silicon nanowire solar cells: fabrication and advanced characterization. In *Nanowires – recent advances.* InTech, 2012.
- 34 Sivaram S.V., Hui H.Y., De La Mata M., Arbiol J., Filler M.A. Surface hydrogen enables subeutectic vapor–liquid–solid semiconductor nanowire growth // *Nano Lett.* -2016. –Vol.16. –Pp. 6717–6723.
- 35 Jansen H., Jansen H., Gardeniens H., Elwenspoek M., Elwenspoek M., Fluitman J., Fluitman J. A survey on the reactive ion etching of silicon in microtechnology // *J. Micromech. Microeng.* -1996. –Vol.6. –Pp. 14–28.
- 36 Zong L., Zhu B., Lu Z., Tan Y., Jin Y., Liu N., Hu Y., Gu S., Zhu J., Cui Y. Nanopurification of silicon from 84% to 99.999% purity with a simple and scalable process // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA.* -2015. –Vol. 112. –Pp. 13473–13477.
- 37 Wheeler L.M., Neale N.R., Chen T., Kortshagen U.R. Hypervalent surface interactions for colloidal stability and doping of silicon nanocrystals // *Nat. Commun.* -2013. –Vol.4. –P.2197.
- 38 Li C., Zhang C., Huang Z. Assembling of silicon nanoflowers with significantly enhanced second harmonic generation using silicon nanospheres fabricated by femtosecond laser ablation // *J. Phys. Chem. C.* -2013. –Vol. 117. –Pp. 24625–24631.
- 39 Bapat A., Anderson C., Perrey C.R., Carter C.B., Campbell S.A., Kortshagen U. Plasma synthesis of single-crystal silicon nanoparticles for novel electronic device applications // *Plasma Phys. Contr. F.* -2004. – Vol. 46. –Pp. B97–B109.
- 40 Iqbal M., Purkait T.K., Goss G.G., Bolton J.R., El-Din G. M., Veinot J.G. Application of engineered Si nanoparticles in light-induced advanced oxidation remediation of a water-borne model contaminant // *ACS Nano.* -2016. –Vol.10. –Pp. 5405–5412.
- 41 Meinardi F., Ehrenberg S., Dharmo L., Carulli F., Mauri M., Bruni, F. R. Simonutti, Kortshagen U., Brovelli S. Highly efficient luminescent solar concentrators based on earth-Abundant indirect-bandgap silicon quantum dots // *Nat. Photon.* -2017. –Vol. 207. –Pp. 177–185.
- 42 He Y., Zhong Y., Peng F., Wei X., Su Y., Lu Y., Su S., Gu W., Liao L., Lee S.T. One-pot microwave synthesis of water-dispersible, ultraphoto- and pH-stable, and highly fluorescent silicon quantum dots // *J. Am. Chem. Soc.* -2011. –Vol.133. –Pp. 14192–14195.
- 43 Shiohara A., Prabakar S., Faramus A., Hsu C.-Y., Lai P.-S., Northcote P.T., Tilley R.D. Sized controlled synthesis, purification, and cell studies with silicon quantum dots // *Nanoscale.* -2011. –Vol. 3. –Pp. 3364–3370
- 44 Litvinenko S., Alekseev S., Lyсенко V., Venturello A., Geobaldo F., Gulina L., Kuznetsov G., Tolstoy V., Skryshevsky V., Garrone E., Barbier D. Hydrogen production from nano-porous Si powder formed by stain etching // *Int. J. Hydrogen Energy.* -2010. –Vol. 35.-P. 6773.
- 45 Osterloh F.E. Inorganic nanostructures for photoelectrochemical and photocatalytic water splitting // *Chem. Soc. Rev.* – 2013. –Vol.42. –Pp. 2294–2320.

- 46 Sun K., Shen S., Liang Y., Burrows P.E., Mao S.S., Wang D. Enabling silicon for solar-fuel production // *Chem. Rev.* -2014. -Vol.114. -Pp. 8662–8719.
- 47 Dai F., Zai J., Yi R., Gordin M. L., Sohn H., Chen Sh., Wang D. Bottom-up synthesis of high surface area mesoporous crystalline silicon and evaluation of its hydrogen evolution performance // *Nature Communications.* -2014. -Vol.5. -P. 3605.
- 48 Song H. Liu D., Yang J., Wang L., Xu H., Xiong Yu. Highly crystalline mesoporous silicon spheres for efficient visible photocatalytic hydrogen evolution. *ChemNanoMat*, -2017. -Vol. 3. -No.1. -Pp. 22-26.
- 49 Liu C., Tang J., Chen H.M., Liu B., Yang P. A fully integrated nanosystem of semiconductor nanowires for direct solar water splitting // *Nano Lett.* -2013. -Vol.13. -Pp. 2989–2992.
- 50 Xiong Z., Zheng M., Liu S., Ma L., Shen W. Silicon Nanowire array/Cu₂O crystalline core-shell nanosystem for solar-driven photocatalytic water splitting // *Nanotechnology.* -2013. -Vol. 24. -P. 265402.
- 51 Ye M., Qian C., Sun W., He L., Jia J., Dong Y., Zhou W. Dye colour switching by hydride-terminated silicon particles and its application as an oxygen indicator // *J. Mater. Chem. C.* -2016. -Vol.4. -Pp. 4577–4583.
- 52 Ghosh R., Giri P.K. Efficient visible light photocatalysis and tunable photoluminescence from orientation controlled mesoporous Si nanowires// *RSC Adv.* -2016. -Vol. 6. -Pp. 35365–35377.
- 53 Guan B., Sun Y., Li X., Wang J., Chen S., Schweizer S., Wang Y., Wehrspohn R.B. Conversion of bulk metallurgical silicon into photocatalytic nanoparticles by copper-assisted chemical etching // *ACS Sustain. Chem. Eng.* -2016. -Vol. 4. -Pp. 6590–6599.

References

- 1 D. Parra et al. *Renewable and Sustainable Energy Reviews.* 101, 279-294 (2019).
- 2 A. A. Ismail et al. *Solar Energy Materials and Solar Cells.* 128, 85-101 (2014).
- 3 D. Yermukhamed et al. *News of the Academy of Sciences of Kazakhstan, Series Chemistry and Technology.* 4(424), 26-38 (2017). In Kazakh.
- 4 K. Hashimoto K. Et al. *Japanese Journal of Applied Physics.* 44(12), 8269-8285 (2005).
- 5 X. Chen et al. *Chem. Rev.* 110, 6503–6570 (2010).
- 6 Y. Moriya et al. *Coord. Chem. Rev.* 257, 1957–1969 (2013).
- 7 J. Ji et al. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics.* 24 4433-4438 (2013).
- 8 G.K. Mussabek et al. *Proceedings of 17-th SGEM 2017, 29 June-5 July 2017, Albena, Bulgaria.* 17, 141- 147 (2017).
- 9 W. Bludau et al. *J. Appl. Phys.* 45, 1846–1848 (1974).
- 10 K.Q. Peng et al. *Nano Today.* 8, 75–97 (2013).
- 11 A.I. Hochbaum and P. Yang, 110, 527–546 (2010).
- 12 G. Broenstrup et al. *ACS Nano.* 4, 7113–7122 (2010).
- 13 S.W. Boettcher et al. *Science.* 327, 185–187 (2010). Et al.
- 14 E. Garnett and P. Yang. *Nano Lett.* 10, 1082–1087 (2010).
- 15 Y.-F. Huang et al. *Nat. Nanotechnol.* 2, 770–774 (2007).
- 16 M.D. Kelzenberg et al. *Nat. Mater.* 9, 239–244 (2010).
- 17 I. Oh et al. *Nano Lett.* 12, 298–302 (2012).
- 18 F. Priolo et al. *Nat. Nanotechnol.* 9, 19–32 (2014).
- 19 B. Delley et al. *Appl. Phys. Lett.* 67, 2370–2372 (1995).
- 20 M. Nolan et al. *Nano Lett.* 7, 34–38 (2007).
- 21 W. Sun et al. *Nat. Commun.* 7, 12553 (2016).
- 22 B.F.P. McVey and R.D. Tilley. *Acc. Chem. Res.* 47, 3045–3051 (2014).
- 23 Z. Li et al. *Nano Today.* 10, 468–486 (2015).
- 24 Z. Kang et al. *J. Am. Chem. Soc.* 12, 12090–12091 (2007).
- 25 A.A. Lapkin et al. *Chem.Eng. J.* 136, 331–336 (2008).
- 26 L.M. Wheeler et al. *Nat. Commun.* 4, 2197 (2013).
- 27 D. Liu et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* 54, 2980–2985 (2015).
- 28 M. Shao et al. *J. Am. Chem. Soc.* 131, 17738–17739 (2009).
- 29 F.Y. Wang et al. *Nanoscale.* 3, 3269–3276 (2011).
- 30 V. Schmidt et al. *Adv. Mater.* 21, 2681–2702 (2009).
- 31 H. Han et al. *Nano Today.* 9, 271–304 (2014).
- 32 M.L. Zhang et al. *J. Phys. Chem. C.* 112, 4444–4450 (2008).
- 33 B. Hoffmann et al. *Nanowires – recent advances.* InTech, 2012.
- 34 S.V. Sivaram et al. *Nano Lett.* 16, 6717–6723 (2016).
- 35 H. Jansen et al. *J. Micromech. Microeng.* 6, 14–28 (1996).
- 36 L. Zong et al. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA.* 112, 13473–13477 (2015).
- 37 L.M. Wheeler et al. *Nat. Commun.* 4, 2197 (2013).
- 38 C. Li et al. *J. Phys. Chem. C.* 117, 24625–24631 (2013).
- 39 A. Bapat et al. *Plasma Phys. Contr. F.* 46, B97–B109 (2004).
- 40 M. Iqbal et al. *ACS Nano.* 10, 5405–5412 (2016).
- 41 F. Meinardi et al. *Nat. Photon.* 207, 177–185 (2017).
- 42 Y. He et al. *J. Am. Chem. Soc.* 133, 14192–14195 (2011).

- 43 A. Shiohara et al. *Nanoscale*. 3, 3364–3370 (2011).
- 44 S. Litvinenko et al. *Int. J. Hydrogen Energy*. 35, 6773 (2010).
- 45 F.E. Osterloh. *Chem. Soc. Rev.* 42, 2294–2320 (2013).
- 46 K. Sun et al. *Chem. Rev.* 114, 8662–8719 (2014).
- 47 F. Dai et al. *Nature Communications*. 5, 3605 (2014).
- 48 H. Song et al. *ChemNanoMat*, 3, 1, 22-26 (2017).
- 49 C. Liu et al. *Nano Lett.* 13, 2989–2992, (2013).
- 50 Z. Xiong et al. *Nanotechnology*. 24, 265402 (2013).
- 51 M. Ye et al. *J. Mater. Chem. C*. 4, 4577–4583 (2016).
- 52 R. Ghosh and P.K. Giri. *RSC Adv.* 6, 35365–35377 (2016).
- 53 B. Guan et al. *ACS Sustain. Chem. Eng.* 4, 6590–6599 (2016).

**В.В. Жуков¹, Т.К. Идрисова², К.М. Мукашев^{3*}, А.Д. Мурадов³,
Т.Х. Садыков², Н.О. Садуев³, Ф.Ф. Умаров⁴, А.Л. Шепетов⁵**

¹Тянь-Шаньская высокогорная научная станция космических лучей, Казахстан, г. Алматы

²КазНИТУ им. Сатпаева К.И., Физико-технический институт, Казахстан, г. Алматы

³НИИЭТФ КазНУ им. аль-Фараби, Казахстан, г. Алматы,

⁴Казахстанско-Британский технический университет, Казахстан, г. Алматы

⁵Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН (ФИАН), Россия, г. Москва

*e-mail: mukashev.kms@gmail.com

АКУСТИЧЕСКИЕ СИГНАЛЫ, СВЯЗАННЫЕ С ПРОХОЖДЕНИЕМ ПРОНИКАЮЩЕГО КОСМИЧЕСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ЧЕРЕЗ СЕЙСМИЧЕСКИ НАПРЯЖЕННУЮ СРЕДУ

Обнаружены спорадические акустические сигналы, предположительно связанные с процессами сейсмической активности в районе разрушения глубокой земной коры. Была обнаружена статистически значимая временная корреляция между такими сигналами и моментами прохождения мюонов космических лучей высоких энергий. Это обстоятельство подтверждает предположение о возможном триггерном эффекте малой ионизации, создаваемой проникающими частицами глубоко под землей, что может вызвать высвобождение энергии упругой деформации, накопленной на краях сейсмического разлома. В случае подтверждения данный эффект может представлять значительный научный и практический интерес при решении проблем прогноза землетрясения. Такие сложные эксперименты можно провести на Тянь-Шаньской высокогорной научной станции. Станция расположена на высоте 3340 м над уровнем моря близ г. Алматы в сейсмически активном регионе. Станция оснащена широкой сетью детекторов для регистрации широких атмосферных ливней космических излучений. Эти ливни являются источником мюонов высокой энергии. Сеть состоит из 72 сцинтилляционных детекторов и занимает площадь 1000 м². Для обнаружения и регистрация акустических сигналов используется специальный микрофонный датчик высокой чувствительности. Датчик размещается в скважине на глубине 50 м не далеко от оси широких атмосферных ливней. О прохождении мюонной компоненты космических лучей еще можно судить по отклику детекторов нейтронов. Эти детекторы размещены под землей на глубине 20 м водного эквивалента. Была обнаружена статистически значимая корреляция между моментами прохождения мюонов космических лучей высокой энергии и последующим появлением акустических событий.

Ключевые слова: мюоны космических лучей, широкие атмосферные ливни, сейсмология, прогноз землетрясений.

V.V. Zhukov¹, T.K. Idrisova², K.M. Mukashev^{3*}, A.D. Muradov³,
T.Kh. Sadykov², N.O. Saduyev³, F.F. Umarov⁴, A.L. Shepetov⁵

¹Tien Shan high-alpine scientific station of cosmic rays, Kazakhstan, Almaty

²Satbayev University, Institute of Physics and Technology, Kazakhstan, Almaty

³IETP Al-Farabi Kazakh National University, Kazakhstan, Almaty,

⁴Kazakh-British Technical University, Kazakhstan, Almaty

⁵Lebedev P.N. Physical Institute of the Russian Academy of Sciences (LPI), Russia, Moscow

*e-mail: mukashev.kms@gmail.com

Acoustic signals associated with the passage of penetrating cosmic radiation through a seismically stressed environment

We detected the sporadic acoustic pulses presumably connected with the processes of seismic activity in the region of a deep earth's crust fracture near Almaty city. It was found a statistically significant time correlation between such pulses and the passage moments of high energy cosmic ray muons. This observation is in favor of a theoretic supposition about possible trigger effect of small ionization created by penetrative particles deep underground which may provoke releasing the energy of elastic deformation accumulated at the edges of a seismic fault. If confirmed, this effect could be of interest for the earthquake forecast problem. Such complex experiments can be carried out at the Tien Shan high-mountain scientific station. The station is located at an altitude of 3340m above sea level near the city of Almaty in

a seismically active region. The station is equipped with a wide network of detectors to register extensive air showers of cosmic radiation. These showers are the source of high energy muons. The network consists of 72 scintillation detectors and covers an area of 1000 m². A special high-sensitivity microphone sensor is used to detect and register acoustic signals. The sensor is placed in a borehole at a depth of 50 m, not far from the axis of extensive air showers. The passage of the muon component of cosmic rays can still be judged by the response of neutron detectors. These detectors are located underground at a depth of 20 m water equivalent. A statistically significant correlation was found between the times of passage of high-energy cosmic ray muons and the subsequent appearance of acoustic events.

Key words: cosmic rays muons, extensive air shower, seismology, earthquake forecast.

В.В. Жуков¹, Т.К. Идрисова², Қ.М. Мұқашев^{3*}, А.Д. Мұрадов³,
Т.Х. Садықов², Н.О. Садуев³, Ф.Ф. Умаров⁴, А.Л. Шепетов⁵

¹Тянь-Шань таулы ғарыш сәулесінің ғылыми станциясы, Қазақстан, Алматы қ.

²Қ.И. Сәтбаев атындағы ҰҒЗТУ, Физика-техникалық институты, Қазақстан, Алматы қ.

³ЭТФҒЗИ, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Қазақстан, Алматы қ.,

⁴Қазақ-Британ техникалық университеті, Қазақстан, Алматы қ.

⁵П.Н. Лебедев атындағы Физика институты, РФА, Ресей, Москва қ.

*e-mail: mukashev.kms@gmail.com.

Сейсмикалық белсенді жер қыртысы арқылы өтімділігі жоғары ғарыш нұрының өтуіне байланысты туындайтын акустикалық сигналдар

Терең кеңістікте орналасқан жер қыртысының сейсмикалық құбылыстарға байланысты бүлінуі кезінде дербес түрдегі дараланған акустикалық сигналдардың пайда болатыны көрсетілген. Табиғаты осы тектес сигналдармен қосарласа туындаған ғарыш сәулесінің энергиясы жоғары мюондары арасында уақытқа байланысты айтарлықтай статистикалық мағынасы бар корреляцияның қалыптасатыны белгілі болды. Бұл жағдай өтімділігі жоғары мюон бөлшектерінің жер асты тереңдігінде әлсіз ионизация арқылы триггерлік әсерді туғызуы туралы болжамды дәлелдеуінің куәсі болса керек. Нәтижесінде сейсмикалық белсенділігі жоғары жер қыртысының бүлінуімен қатар, оның айналасында қорланған серпімді энергияның босануына, сол арқылы дербес акустикалық сигналдың таралуына мүмкіндік туады. Егер бұл құбылыстар нақты эксперименттермен толық дәлелденетін болса, оның нәтижелері жер сілкінісі туралы болжамдық мағынадағы пікірлерді шешу жолындағы маңызды және құнды еңбектер қатарына қосылатыны сөсіз. Мұндай күрделі экспериментті Тянь-Шань биік таулы ғылыми станциясында орындауға болады. Станция теңіз деңгейінен 3400 м биіктікте, сейсмикалық белсенді ауданда орналасқан. Станция кең ауқымды атмосфералық нөсерді тіркеу үшін арнайы құрылған детекторлар жүйесімен жабдықталған. Жүйе 72 сцинтилляциялық детектордан тұрады және 1000 м² ауданды қамтиды. Атмосфералық нөсер энергиясы жоғары мюондар көзі болып табылады. Акустикалық сигналдарды анықтап, қатесіз тіркеу үшін айрықша сезімтал микрофонды датчик қолданылады. Датчик атмосфералық нөсердің осі өтетін жерге жақын, тереңдігі 50 м скважинаға орналастырылған. Сонымен қатар, ғарыш сәулесінің мюондық құраушысы туралы ақпарат арнайы құрылған жер асты нейтрондар детекторларының көмегімен өндіріледі. Нәтижесінде үздіксіз 6800 сағат уақытқа созылған эксперимент нәтижесінде ғарыш сәулесінің мюондық құраушысы мен акустикалық сигналдардың арасындағы корреляцияның бар екендігі анықталды.

Түйін сөздер: ғарыш сәулесінің мюондары, ауқымды атмосфералық нөсер, сейсмология, жер сілкінісі туралы болжам.

Введение

Известно, что значительная энергия упругой деформации на краях сейсмического разлома, возникающая из-за их взаимного смещения, может дать начало микротрещинам, сопровождающимся генерацией упругих колебаний в литосферной среде. Эти вибрации распространяются через земную кору в форме звуковой волны, называемой акустической эмиссией, которые в принципе могут быть обнаружены с помощью чувствительных микрофонных датчиков, рас-

положенных вблизи земной поверхности [1-3]. Регулярный мониторинг интенсивности этих сигналов может быть полезным для установления текущих состояний на глубине литосферы в реальном времени и для оперативного прогнозирования землетрясений [4,5]. Любое выделение значительной энергии деформации, накопленной в области сейсмического разлома, вместе с последующим образованием микротрещин может быть спровоцировано извне довольно небольшим триггерным эффектом. В теоретических исследованиях, ранее проведен-

ных в Физическом институте им. П.Н. Лебедева (ФИАН) [6,7], утверждалось, что ионизация, создаваемая в литосфере взаимодействием проникающих элементарных частиц, вполне достаточна для того, чтобы играть роль такого триггерного эффекта. Соответственно, в работе [8] было предложено реальный метод решения этой проблемы, основанный на использовании мюонов высокой энергии, способных достигать глубоких подземных областей и взаимодействовать с веществом литосферы на глубине порядка нескольких километров.

Подходящим местом для экспериментальной проверки этой гипотезы является Тянь-Шаньская высокогорная станция космических излучений ФИАН, которая расположена в сейсмически активном регионе, чуть выше древнего разлома земной коры. В свое время в работе [9] сообщалось о некоторых предварительных результатах эксперимента на Тянь-Шане по поиску задержанных коротких временных сигналов акустической эмиссии после прохождения моментов энергичных мюонов космических лучей. В настоящее время на станции действует широкая сеть детекторов, позволяющая обнаруживать и регистрировать широкие атмосферные ливни (ШАЛ), которые могут быть источником энергетических мюонов, и довольно точно определять параметры этих ШАЛ – их размер, первичную энергию, местоположение оси и т.д. Для обнаружения сигналов акустической эмиссии можно использовать специальный датчик, который построен на основе высокочувствительного микрофона и установлен в непосредственной близости от центра ливневой установки, в 50 м под землей в пробуренной скважине на территории станции Тянь-Шань. Следовательно, можно провести статистический временной корреляционный анализ между событиями ШАЛ и любыми акустическими сигналами сейсмического происхождения, чтобы прояснить вопрос о предполагаемой связи между ними. Предметом настоящей публикации являются результаты такого корреляционного анализа, выполненного по данным 6800-часового эксперимента по одновременному обнаружению ШАЛ и акустического сигнала, который проводился на станции Тянь-Шань в 2017–2019 годах.

Экспериментальное обеспечение исследований

В эксперименте в Тянь-Шане широкие атмосферные ливни регистрируются системой из

72 сцинтилляционных детекторов заряженных частиц, которые расположены почти на равном расстоянии на площади 1000 м² и называются «ковер-детектор». События ШАЛ обнаруживаются с помощью специальной схемы дискриминатора, которая вырабатывает управляющий импульс – триггер ливня в моменты, когда амплитуда сцинтилляции, суммируемая по всем детекторам ковра, превышает предварительно установленное некоторое пороговое значение. При текущих настройках эта система генерирует около 3–5 триггеров в минуту, что соответствует эффективному выбору всех ШАЛ с первичной энергией выше 10¹⁵ эВ, оси которого падали на детектор. Каждое событие триггерного эффекта, включенное в банк данных станции Тянь-Шаня, сопровождается его точной отметкой во времени. Любое сравнение данных событий ШАЛ с наборами данных других экспериментальных установок производится на основе этих временных меток.

Основные параметры ШАЛ – две координаты (x ; y) местоположения оси ливня и общее количество заряженных частиц в ливне (его размер N_e) определяются поперечным распределением экспериментально измеренной плотности частиц по плоскости детекторов ковра. Эта оценка производится путем аппроксимации экспериментального двумерного (x ; y) распределения набором теоретических функций, принадлежащих семейству Нисимура-Камата-Грайзен (НКГ) [10]. Согласно оценкам, выполненным во время экспериментов на станции Тянь-Шаня, вышеупомянутый энергетический порог в 10¹⁵ эВ соответствует минимальному значению размера ШАЛ [11,12]. Как правило, в каждом таком ливне присутствуют некоторые мюоны с энергией выше 0,1–1 ТэВ, которые способны проникать в земную кору на глубину порядка километра. При дальнейшем увеличении первичной энергии общее количество высокоэнергетических мюонов в ШАЛ растет почти пропорционально ε_0 [13, 14].

Помимо использования данных ШАЛ, на станции Тянь-Шань имеется еще один источник информации о мюонной компоненте космических лучей. Нахождение мюонов высоких энергий может свидетельствовать наблюдение событий множественного рождения нейтронов в подземном детекторе нейтронов станции Тянь-Шань. Этот детектор находится в подземной комнате, прямо под ковриком детектора ШАЛ, под слоем поглотителя породы толщиной 2000г/см² [10].

Процесс образования нейтронов в подземном детекторе подробно рассмотрен в работе [15], где было показано, что такие события в основном происходят из-за взаимодействия мюонов высокой энергии ($>5\text{ГэВ}$) во внутреннем материале подземного детектора. Это может быть либо прямое ядерное взаимодействие мюонов, либо процесс тормозного излучения с дальнейшим образованием нейтронов путем фотоядерной реакции жестких гамма-квантов. В любом случае нейтроны испарения, возникающие в результате таких процессов, могут регистрироваться газоразрядными нейтронно-чувствительными счетчиками, которые являются частью подземного детектора. Общее количество электрических импульсных сигналов, полученные от этих счетчиков в течение некоторого ограниченного промежутка времени после первичного мюонного взаимодействия, могут быть мерой как кратности, так и энергии проходящих мюонов. Продолжительность периода накопления импульсов, необходимого для этой цели, ограничена сверху временем жизни нейтрона во внутреннем объеме детектора, а для подземного детектора станции Тянь-Шань она составляет порядка нескольких миллисекунд [10]. Как и в случае с ШАЛ, информация о каждом обнаруженном событии нейтронной генерации в подземном детекторе сохраняется в специальной таблице базы данных, сопровождаемой точной отметкой времени для сравнения с другими данными.

Следующий комплекс данных, крайне важный в данном случае, был получен в измере-

ниях с помощью акустического датчика высокогорной научной станции Тянь-Шаня. Этот детектор состоит из высокочувствительного микрофонного блока и последующей специализированной электроники, которая необходима для усиления, формирования и записи выходного микрофонного сигнала. Микрофон с чувствительностью 20 мВ/Па в диапазоне частот $0,5\text{--}10\text{ кГц}$ установлен на глубине 50 м ниже поверхности земли, в скважине глубиной 300 м . Расстояние между центром этой скважины и центром детекторной системы ШАЛ составляет около 250 м . В работах [16, 17] можно найти более подробное описание акустического детектора Тянь-Шаня, а также схему электроники, которая применялась для обработки его выходного сигнала.

Акустические события и их статистика

Как выяснилось, в целом записи мониторинга сигнала акустического детектора имеют довольно равномерный характер с небольшими случайными колебаниями вокруг среднего уровня. Тем не менее, иногда кратковременные всплески интенсивности сигнала происходят спорадически и накладываются на это регулярное поведение. Как правило, длительность этих возмущений составляет порядка нескольких долей секунды, а их пиковая интенсивность превышает на порядок значения стандартного отклонения обычных колебаний. Пример такой формы сигнала показан на левом графике рис. 1.

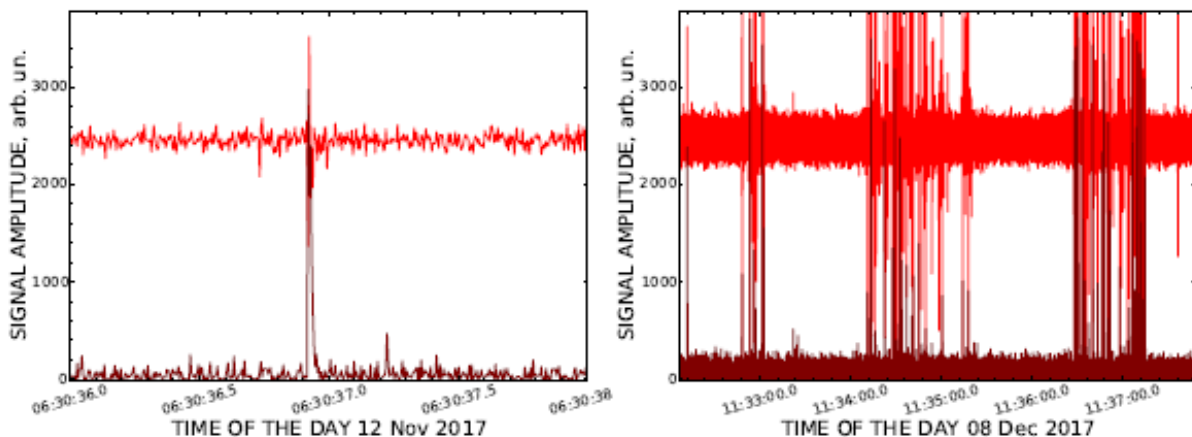


Рисунок 1 – Слева: типичное спорадическое нарушение в регулярной форме волны сигнала акустического детектора («акустическое событие»). Справа: период множественных нарушений, выявленных в течение дня с высокой сейсмической активностью. Верхние кривые на графиках представляют прямой микрофонный сигнал, нижние – его интегральную низкочастотную огибающую.

Как правило, между моментами таких интенсивных всплесков не было выявлено никакой закономерности, поэтому частота их наблюдения может варьироваться от нуля до нескольких сотен событий в день без какой-либо очевидной закономерности. Также не было выявлено какой-либо корреляции между этими всплесками и метеорологическими явлениями, электромагнитными помехами, человеческой активностью и т. д. Из-за их краткости, высокой амплитуды и временной нерегулярности в сочетании, тем не менее, с постоянным внешним фактором в течение двухлетнего непрерывного периода наблюдения, можно предположить, что обнаруженные всплески амплитуды сигнала микрофона действительно могут быть видимым проявлением акустических импульсов сейсмического происхождения, которые были получены на основании выше упомянутого теоретического предположения. В дальнейшем такие амплитудные всплески будут обозначаться как «акустические события».

Для численного анализа свойств их статистики было принято следующее формальное правило во время данного исследования: акустическое событие – это любой случай, когда 12-разрядный код аналого-цифрового преобразователя (АЦП) сглаженной низкочастотной огибающей микрофонного сигнала на мгновение превысит минимальный порог в $\times 700$. Как видно на рис. 1, событие, представленное на его левом графике, вполне удовлетворяет этому критерию. Для выяснения природы акустических событий может быть полезно рассмотреть статистику их ча-

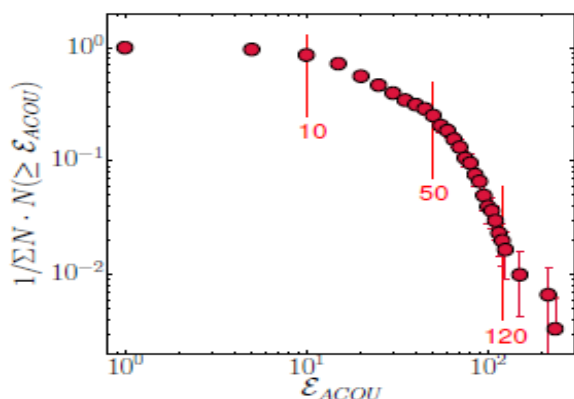


Рисунок 2 – Интегральное распределение ежедневных счетных чисел $\varepsilon_{ACOУ}$ событий. Распределение нормируется на общее число ΣN всех обнаруженных событий

стоты появления. Интегральное распределение ежедневных количественных показателей таких событий $\varepsilon_{ACOУ}$ представлено на рис. 2. Как правило, это распределение имеет вид мощности, но испытывает изменение своего показателя мощности около некоторого граничного значения $\varepsilon_{ACOУ} = 10, 50$ и 100 . Предположительно, эти изменения могут отражать некоторое различие в лежащих в основе специфики модели генерации акустических событий. В качестве другой иллюстрации такого различия в ежедневных частотах акустических событий можно провести сравнение между двумя кадрами на рис. 1: левый график с одним событием, видимым в течение всего дня ($\varepsilon_{ACOУ} = 1$), и тем, что справа с некоторыми сериями импульсов, обнаруженными через короткие промежутки времени в течение дня при чрезвычайно высоком значении $\varepsilon_{ACOУ}$.

Два распределения значений пиковой амплитуды, которые были обнаружены в низкочастотном канале во время акустических событий, представлены на рис. 3 отдельно для данных с низким ($\varepsilon_{ACOУ} < 10$) и высоким ($\varepsilon_{ACOУ} > 50$) количеством ежедневных событий. (Амплитуда сигнала тут выражается в кодах А системы АЦП регистрации данных акустического датчика). Из рис. 3 видно, что оба распределения амплитуд пиков имеют сходную, почти экспоненциальную форму, но отличаются друг от друга на порядок по абсолютной интенсивности. Это отличие может быть связано, опять же, с некоторым различием в происхождении событий, которые были обнаружены в течение периодов времени с различной множественностью акустических событий.

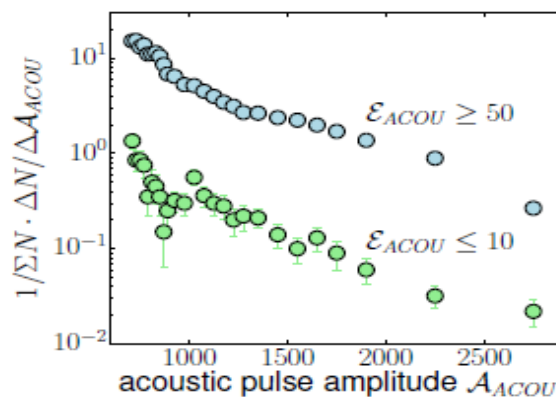


Рисунок 3 – Распределение амплитуд акустических событий, обнаруженных в дни с малыми ($\varepsilon_{ACOУ} < 10$) и большими ($\varepsilon_{ACOУ} > 50$) числами отсчета событий. Распределения нормированы на сумму событий ΣN в каждой группе

Распределение временной задержки между ШАЛ и акустическими событиями

Исходя из предположения о сейсмическом происхождении акустических событий и их связи с выделением энергии упругой деформации при спусковом воздействии проникающих мюонов в глубокой области сейсмического разлома, логично искать некоторую временную корреляцию между моментами прохождения мюонов и временем прихода акустического сигнала. Известно, что высокоэнергетические мюоны, в том числе обладающие энергией выше $(0,1-1)$ ТэВ и способные проникать в глубину порядка нескольких километров в литосфере, присутствуют в центральной области мощного ШАЛ. Следовательно, момент их прохождения может быть строго зарегистрирован с помощью триггера ШАЛ, установленного на Тянь-Шаньской установке ливневых детекторов. Любая другая информация, полученная из этой установки, в первую очередь о размере ε_0 соответствующего ливня, также может быть полезна для предполагаемого анализа. На практике последнее можно свести к исследованию распределения значений задержки $T = t_{ACOU} - t_{шал}$ между временными моментами акустических событий t_{ACOU} и моментами $t_{шал}$ всех предшествующих ливней с достаточно большой первичной энергией ε_0 . Фактически, в таком исследовании нам приходится иметь дело с двумя последовательностями по существу случайных явлений, и члены обеих явлений могут иметь или не иметь никакой причинно-следственной связи друг с другом. Следовательно, возникает проблема устранения влияния случайных совпадений между моментами времени полностью независимых событий от ожидаемого полезного эффекта. Для этого при работе с экспериментальными данными были применены следующие правила.

В рассмотрение были включены только те события ШАЛ, которые имели достаточно большую первичную энергию $\varepsilon_0 > 10^{15}$ эВ, оси которых проходили на расстоянии до 150 м от скважины с установленным акустическим датчиком. Интегральная интенсивность таких ШАЛ составляет около $\sim (20-30)ч^{-1}$, и каждый из них имел, по крайней мере, несколько высокоэнергетических мюонов в своей центральной области. Это условие позволяет исключить множество низкоэнергетических ливней, которые, безусловно, неэффективны с точки зрения влияния триггера на глубине литосферы, но дают большое количество случайных совпадений в любом статистическом распределении. Данное фор-

мальное правило, касающееся минимального кода амплитуды отбора акустических событий $A > 700$, также было принято с учетом необходимости подавления случайного фона.

Кроме того, все периоды времени, когда средняя скорость ветра на территории станции Тянь-Шань превышала предел 11 м/с., были исключены из процесса анализа. Это есть условие фильтрации помех по ветреным дням, когда в записях сигналов акустического детектора были возможны помехи из-за шума со стороны верхней части отверстия скважины. Относительная доля измерений, отклоненных по этой причине, составляет около 5% от общего рабочего времени экспериментальной установки. Распределение временной задержки, которое было определено по исходному экспериментальному временному ряду, можно сравнить с довольно аналогичным распределением, построенным для набора пар меток времени, выбранных для моментов, которые, конечно, не могут иметь какой-либо причинной взаимосвязи с друг с другом. При таком сравнении полезно иметь в виду существенное различие, рассмотренное выше, между периодами различных суточных чисел ε_{ACOU} акустических событий. Соответственно, распределения T и T^* задержки, представленные на рис. 4 и рис. 5, были построены отдельно для дней с $\varepsilon_{ACOU} < 10$, $10 < \varepsilon_{ACOU} < 50$ и $\varepsilon_{ACOU} > 50$.

Как видно на рис. 4, в «тихие» периоды с небольшим ежедневным количеством акустических событий распределения временной задержки значений T и T^* практически накладываются друг на друга, поэтому разница между ними остается в пределах $(1-1.5) \sigma$ коридора во всем диапазоне оси абсцисс, начиная с нуля и до 0,5 ч. времени задержки. Отсутствие каких-либо заметных различий в построении распределений для экспериментальных и искусственно рандомизированных наборов данных означает совершенно случайный характер любых совпадений, которые могут быть обнаружены между ШАЛ и акустическими событиями в те дни.

Акустические события и мюонные данные подземного детектора

Как было изложено в разделе «Инструментарий», альтернативный метод обнаружения прохождения высокоэнергетических мюонов космических лучей в эксперименте на Тянь-Шане основан на данных подземного детектора нейтронов. При таком подходе в качестве маркера мюонов космических лучей можно использовать наблюдение «нейтронного со-

бытия» – нестационарной генерации множества нейтронов испарения внутри детектора.

Наиболее важным параметром нейтронного события является его кратность M – общее количество импульсных сигналов, обнаруженных счетчиками нейтронов подземного детектора. Для настоящего корреляционного анализа с акустическими данными были приняты только те

события, кратности которых были равны или превышали $M_{\min} = 10$. Как было показано в [15], такие события соответствуют прохождению мюонов с энергией 100 ТэВ, которые способны проникать на глубину (5–10) км в земную кору. Частота обнаружения таких событий на подземном детекторе станции Тянь-Шань составляет около (10–15) ч⁻¹.

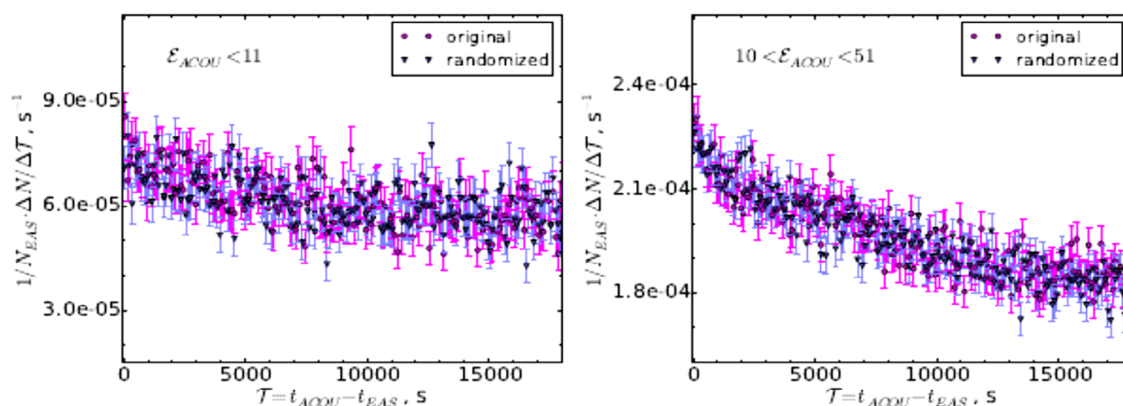


Рисунок 4 – Распределение задержки по времени между моментами мощного ШАЛ и последующими акустическими событиями, построенными по данным «тихих» периодов с ежедневными числами акустических событий $\varepsilon_{ACO} < 10$ (слева) и $10 < \varepsilon_{ACO} < 50$

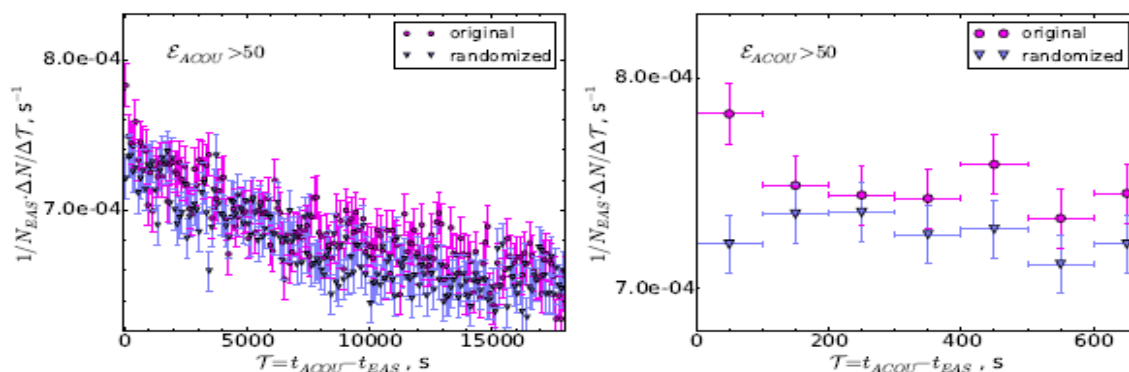


Рисунок 5 – Распределение временной задержки между ШАЛ и моментами акустических событий, построенными для данных с большим ежедневным количеством акустических событий $\varepsilon_{ACO} > 50$. На правом графике горизонтальная ось растянута вокруг своего начала. Обозначения такие же, как на рис. 4.

Процесс работы, основанный на подземных нейтронных событиях в роли маркера мюонного прохождения, был выполнен точно так же, как и в случае ШАЛ: значения разности во времени $T = t_{M>10} - t_{ACO}$ были рассчитаны между моментами акустического воздействия события и нейтронные события с кратностью $M > 10$. Затем было построено распределение задержек. Далее вся процедура повторялась для тех же наборов данных, но со всеми исходными моментами вре-

мени $t_{M>10}$ изменялись на совершенно случайные значения t .

На рис. 6 приведено сравнение распределений времени и задержки T и T^* , построенных соответственно для исходного и рандомизированного временных рядов подземных нейтронных событий. Поскольку события $M > 10$ под землей, как правило, являются довольно редким явлением, временной интервал столбцов гистограммы здесь был установлен равным 800 с

вместо 100-секундных интервалов, принятых в случае данных ШАЛ. Основываясь на предыдущем опыте, при выборе данных для этого графика были рассмотрены только даты с большим количеством ежедневных акустических событий $\varepsilon_{ACOU} > 50$. Как видно из рис. 6, в интервале времени задержки $T < 800$ с наблюдается статистически значимое превышение целочисленных значений экспериментально обнаруженного распределения задержки выше ожидаемого фоновое уровня случайных совпадений. Кроме того, систематическое превышение точек экспериментальных данных над рандомизированным распределением также заметно, хотя и с меньшей статистической достоверностью по всей продолжительности оси T от нуля до порядка нескольких часов времени. Оба этих факта могут рассматриваться как еще одно свидетельство существования какой-то нетривиальной связи между высокоэнергетическими мюонами космических лучей и кратковременными всплесками акустической эмиссии, обнаруженными под поверхностью Земли.

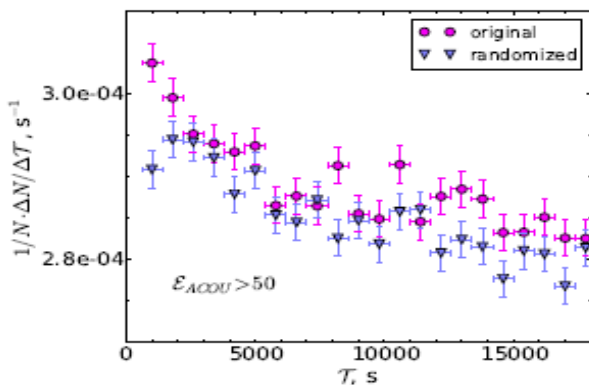


Рисунок 6 – Распределение временной задержки между прохождением энергетических мюонов, детектируемое событиями подземных нейтронов с $M > 10$, и последующими акустическими событиями. Были рассмотрены только дни с большим числом акустических событий $\varepsilon_{ACOU} > 50$. Распределение нормируется на количество N нейтронных событий, используемых анализом. Ширина одного временного интервала составляет 800 с.

Заключение

Все рассмотренные выше результаты настоящего исследования могут быть обобщены следующим образом:

На высокогорной станции Тянь-Шаня было заложено начало экспериментальным исследо-

ваниям с целью практического использования сигнала акустической эмиссии, предположительно связанного с процессами, происходящими в области глубокого сейсмического разлома.

Во время этого эксперимента короткие интенсивные всплески, называемые «акустическими событиями», были обнаружены среди обычно однородных записей акустической эмиссии. Как правило, пиковая амплитуда, обнаруженная в этих событиях, на порядок выше среднего уровня дисперсии акустического сигнала, и их типичная длительность не превышает доли секунды.

Скорость счета акустических событий варьируется в широком диапазоне – от нуля до нескольких сотен событий в день. По-видимому, статистические свойства распределения событий, обнаруженных в дни с большим количеством ежедневных счетов ≥ 50 , существенно отличаются от свойств данных с низким счетом.

Была обнаружена статистически значимая корреляция между моментами прохождения мюонов космических лучей высокой энергии (≥ 100 ТэВ) и последующим появлением акустических событий в течение времени задержки (100–1000 с). Такая корреляция проявляется в основном только в дни с высокой скоростью счета акустических событий.

Поскольку мюоны указанной энергии способны проникать непосредственно вблизи глубокого сейсмического разлома, расположенного под горной станцией Тянь-Шаня, обнаруженная временная корреляция может быть экспериментальным подтверждением теоретического предположения о стимуляции акустической эмиссии в сейсмически активной области под небольшим триггерным влиянием частиц космического излучения. Если эта гипотеза будет подтверждена дальнейшими исследованиями, систематическое изучение таких корреляций может стать перспективным инструментом для оперативного мониторинга текущих условий в зоне сейсмического разлома, включая проблему прогноза землетрясения. Подходящим местом для развития такой экспериментальной деятельности является высокогорная станция Тянь-Шаня, благодаря существующему в настоящее время многоцелевому детекторному комплексу.

Благодарность




Данная работа выполнена при поддержке МОН РК по программно-целевому финансированию BR05236497.

Литература

- 1 Chavroshkin O.B., Nikolaev A.V., Rykunov L.N., and Tsyplakov V.V. Methods, results and perspectives of the high frequency seismic noise and vibrosignals //In 6th Rep IASPEL Comm. Microseismol. 18 IUGG, Hamburg, Germany, 1983.
- 2 Paparo G., Gregori G.P., De Ritis R., and Taloni A. Acoustic emission (AE) as a diagnostic tool in geo-physics //Ann. Geophys. – 2002. – Vol. 45(2). – P.401–416.
- 3 Lei X. and Ma S. Laboratory acoustic emission study for earthquake generation process. //Earthq. Sci. – 2014. – Vol.27. – P.627-646.
- 4 Jasperson H., Bolton C., Johnson P., et al. Unsupervised classification of acoustic emissions from catalogs and fault time-to-failure prediction. //arXiv:1912.06087 [physics.geo-ph]. – 2019. – 10 p.
- 5 Rouet-Leduc B., Hulbert C., Lubbers N., et al. Machine learning predicts laboratory earthquakes. //Geophys. Res. Lett. – 2017. – Vol. 44. – P.9276-9282.
- 6 Tsarev V.A. Geophysical applications of neutrino beams. //Soviet Physics Uspekhi. – 1985. – Vol. 28(10). – P.940.
- 7 Tsarev V.A. and Chechin V.A. Atmospheric muons and high-frequency seismic noise. //LPI Preprint. – 1988. –No.179.
- 8 Gusev G.A., Zhukov V.V., Merzon G.I., et al. Cosmic rays as a new instrument of seismological studies //Bull. Lebedev Phys. Inst. – 2011. – Vol.38(12). – P.374-379.
- 9 Vildanova L.I., Gusev G.A., Zhukov V.V., et al. The first results of observations of acoustic signals generated by cosmic ray muons in a seismically stressed medium. //Bull. Lebedev Phys. Inst. – 2013. – Vol.40(3). – P.74-79.
- 10 Chubenko A.P., Shepetov A.L., Antonova V.P., et al. New complex EAS installation of the Tien Shan mountain cosmic ray station. //Nucl. Instrum. Methods A. – 2016. – Vol. 832. – P.158-178.
- 11 Ryabov V.A., Almenova A.M., Antonova V.P., et al. Modern status of the Tien-Shan cosmic ray station. //EPJ Web of Conf. – 2017. – Vol.145. – P.12001.
- 12 Adamov D.S., Afanasjev B.N., Arabkin V.V., et al. Phenomenological characteristics of EAS with $N_e = 2 \cdot 10^5 - 2 \cdot 10^7$ obtained by the modern Tien-Shan installation “Hadron” //In Proceedings of the 20th ICRC, Moscow. – 1987. – Vol.5. – P.460-463.
- 13 Antoni T., Apel W.D., Badea A.F., et al. Muon density measurements with the KASCADE central detector //Astropart. Phys. – 2002. – Vol.16. – P.373–386.
- 14 Pierog T. and Werner K. Muon production in extended air shower simulations //Phys. Rev. Lett. – 2008. – Vol.101. N 171101.
- 15 Shepetov A., Chubenko A., Kryakunova O. et al. Under-ground neutron events at Tien Shan //J. Phys.: Conf. Ser. – 2019. – Vol. 1181. – N 012017.
- 16 Shepetov A.L., Sadykov T.Kh., Mukashev K.M., et al. Seismic signal registration with an acoustic detector at the Tien Shan mountain station //News of the National academy of sciences of the RK, series of geology and technical sciences. – 2018. – Vol.429(3). – P.47–56.
- 17 Mukashev K.M., Sadykov T.Kh., Ryabov V.A., et al. Investigation of acoustic signals correlated with the flow of cosmic ray muons in connection with seismic activity of Northern Tien Shan. //Acta Geophys., – 2019. – Vol.67(4). – P.1241–1251.

References

- 1 O.B. Chavroshkin, A.V. Nikolaev, L.N. Rykunov, and V.V. Tsyplakov, Methods, results and perspectives of the high frequency seismic noise and vibrosignals, In 6th Rep IASPEL Comm. Microseismol, (18 IUGG, Hamburg, Germany, 1983).
- 2 G. Paparo, G.P. Gregori, R. De Ritis, and A. Taloni, Ann. Geophys., 45(2), 401–416 (2002).
- 3 X. Lei and S. Ma, Earthq. Sci., 27, 627–646 (2014).
- 4 H. Jasperson, C. Bolton, P. Johnson, et al, arXiv:1912.06087 [physics.geo-ph] (2019).
- 5 B. Rouet-Leduc, C. Hulbert, N. Lubbers, et al, Geophys. Res. Lett., 44, 9276–9282 (2017).
- 6 V.A. Tsarev, Soviet Physics Uspekhi, 28 (10), 940 (1985).
- 7 V.A. Tsarev and V.A. Chechin, LPI Preprint No. 179 (1988).
- 8 G.A. Gusev, V.V. Zhukov, G.I. Merzon, et al, Bull. Lebedev Phys. Inst., 38(12), 374–379 (2011).
- 9 L.I. Vildanova, G.A. Gusev, V.V. Zhukov, et al, Bull. Lebedev Phys. Inst., 40(3), 74–79 (2013).
- 10 A.P. Chubenko, A.L. Shepetov, V.P. Antonova, et al, Nucl. Instrum. Methods A, 832, 158-178, (2016).
- 11 V.A. Ryabov, A.M. Almenova, V.P. Antonova, et al, EPJ Web of Conf., 145, 12001 (2017).
- 12 D.S. Adamov, B.N. Afanasjev, V.V. Arabkin, et al. Phenomenological characteristics of EAS with $N_e = 2 \cdot 10^5 - 2 \cdot 10^7$ obtained by the modern Tien-Shan installation “Hadron”. In Proceedings of the 20th ICRC, Moscow, 5, 460–463 (1987).
- 13 T. Antoni, W.D. Apel, A.F. Badea, et al, Astropart. Phys., 16, 373-386 (2002).
- 14 T. Pierog and K. Werner, Phys. Rev. Lett., 101, 171101 (2008).
- 15 A. Shepetov, A. Chubenko, O. Kryakunova, et al, J. Phys.: Conf. Ser., 1181, 012017 (2019).
- 16 A.L. Shepetov, T.Kh. Sadykov, K.M. Mukashev, et al, News of the National academy of sciences of the RK, series of geology and technical sciences, 429(3), 47–56 (2018).
- 17 K.M. Mukashev, T.Kh. Sadykov, V.A. Ryabov, et al, Acta Geophys., 67(4), 1241-1251 (2019).

Н.Е. Аханова¹ , Е. Ерланулы¹ ,
С.А. Дарзбек², Д.Г. Батрышев^{1,3*} 

¹Казахстанско-Британский технический университет, Казахстан, г. Алматы

²Научно-исследовательский центр по изучению свойств поверхности и вакуума, Россия, г. Москва

³Атырауский университет им. Х. Досмухамедова, Казахстан, г. Атырау,

*e-mail: batryshev@physics.kz

ИЗУЧЕНИЕ КОЛЕБАНИЯ ПЬЕЗОЭЛЕКТРИКА С ПОМОЩЬЮ ЛАЗЕРНОЙ ИЗМЕРИТЕЛЬНОЙ СИСТЕМЫ

На сегодняшний день акустические методы неразрушающего контроля занимают особое место в процессе диагностики технического состояния промышленных устройств и объектов для обеспечения их безопасной и надежной эксплуатации. И для этих целей в качестве специализированного инструмента используются так называемые акустоэлектрические преобразователи, работа которых основана на преобразовании механического смещения в электрический сигнал. Подобные преобразователи по-другому называют пьезоэлектриками, на которых налагаются особые требования к чувствительности и надежности. Для обеспечения подобных технических характеристик применяют процедуры по калибровке и проверке на основе оптических методов исследований. Данная работа посвящена подобному роду исследования, а именно изучению колебания пьезоэлектрика с помощью лазерной измерительной системы, работающей по принципу интерферометра А. Майкельсона. В ходе эксперимента было установлено, что изменение показателей механического колебания керамического пьезоэлектрика приводит к изменению формы регистрируемого сигнала фотодетектора (интерференционной картины). Известно, что в процессе оптических измерений имеет место ряд неконтролируемых шумов, и для снижения их воздействий, в том числе шумов от самого фотодетектора необходимо понижение частоты и амплитуды колебания пьезоэлектрика. Показано, что использование расчетной фильтрации позволяет выделить полезный сигнал и удобно определить зависимость смещения пьезоэлектрика от времени.

Ключевые слова: пьезоэлектрик, колебание, интерферометр, смещение, осциллограмма, лазер, вибросигнал.

N.E. Akhanova¹, Ye. Yerlanuly¹, S.A. Darznek², D.G. Batryshev^{1,3*}

¹Kazakh-British technical university, Kazakhstan, Almaty

²Research center for the study of surface and vacuum properties, Russia, Moscow

³Kh.Dosmukhamedov Atyrau university, Kazakhstan, Atyrau,

*e-mail: batryshev@physics.kz

Study of piezoelectric oscillations by using a laser measuring system

Today, acoustic non-destructive testing methods play an important role in the process of diagnosing the technical condition of industrial devices and facilities to ensure their safe and reliable operation. For these purposes, the so-called acoustoelectric transducers are used as a specialized tool, which is based on the conversion of mechanical displacement into an electrical signal. On the other hand, such converters are called piezoelectrics, which have to have special properties as sensitivity and reliability. Calibration and verification procedures based on optical research methods are used to ensure such technical characteristics. This work is devoted to a similar kind of research, namely, the study of oscillations of a piezoelectric using a laser measuring system operating on the principle of the A. Michelson interferometer. In the experimental works, it was found that a change in the parameters of the mechanical vibration of a ceramic piezoelectric leads to a change in the shape of the recorded signal of the photodetector (interference pattern). It is known that in the process of optical measurements there are several uncontrolled noises, and to reduce their effects, including noise from the photodetector itself, there is a need to reduce the frequency and amplitude of oscillation of the piezoelectric. It is shown that the use of calculated filtering makes it possible to isolate the useful signal and conveniently determine the dependence of the piezoelectric displacement on time.

Key words: piezoelectric, oscillation, interferometer, displacement, oscillogram, laser, vibration signal.

Н.Е. Аханова¹, Е. Ерланұлы¹, С.А. Дарзбек², Д.Ф. Батрышев^{1,3*}

¹Қазақстан-Британ техникалық университеті, Қазақстан, Алматы қ.

²Вакуум және беттік қасиеттерін зерттеу жөніндегі ғылыми-зерттеу орталығы, Ресей, Мәскеу қ.

³Х. Досмұхамедов атындағы Атырау университеті, Қазақстан, Атырау қ.

*e-mail: batryshev@physics.kz

Лазерлік өлшеу жүйесі арқылы пьезоэлектрлік тербелісті зерттеу

Қазіргі таңда бұзылмайтын бақылаудың акустикалық әдістері өнеркәсіптік құрылғылар мен объектілердің техникалық жағдайын диагностикалау процесінде олардың қауіпсіз және сенімді жұмыс істеуін қамтамасыз ету үшін ерекше орын алады. Осы мақсатта арнайы құрал ретінде акустоэлектрлік түрлендіргіштер қолданылады, олардың жұмысы механикалық ығысуды электр сигналына айналдыруға негізделген. Мұндай түрлендіргіштер сезімталдығы мен сенімділігіне ерекше талаптар қойылатын, пьезоэлектриктер деп аталады. Осындай техникалық сипаттамаларды қамтамасыз ету үшін оптикалық зерттеу әдістері негізінде калибрлеу және тексеру процедуралары қолданылады. Бұл жұмыс осындай зерттеуге арналған, атап айтқанда А. Майкельсонның интерферометр принципі бойынша жұмыс істейтін лазерлік өлшеу жүйесін қолдана отырып, пьезоэлектрлік тербелісті зерттеуге арналған. Тәжірибе барысында керамикалық пьезоэлектриктің механикалық тербеліс көрсеткіштерінің өзгеруі фотодетектордың (интерференциялық сурет) тіркелген сигналының пішінінің өзгеруіне әкелетіні анықталды. Оптикалық өлшеу процесінде бірқатар бақыланбайтын шуылдар бар екендігі белгілі және олардың әсерін азайту үшін, соның ішінде фотодетектордан шыққан шуылды азайту үшін пьезоэлектрик тербелісінің жиілігі мен амплитудасын төмендету қажет. Есептік сүзгілеуді қолдану пайдалы сигналды бөліп көрсетуге және пьезоэлектриктің уақытқа тәуелділігін қажетті дәрежеде анықтауға мүмкіндік беретіні көрсетілген.

Түйін сөздер: пьезоэлектрик, тербеліс, интерферометр, ығысу, осциллограмма, лазер, діріл сигналы.

Введение

Растущий интерес к прикладным нанотехнологическим процессам в последние годы повысил спрос на системы, способные качественно измерять в нанометрическом и субнанометрическом масштабах с высоким разрешением. Одним из широко развивающихся направлений является методы и средства оптических измерений (лазерной интерферометрии-фазометрии), опирающихся на фундаментальные константы и эталоны физических величин. В случае нанометрических измерений классические методы интерферометрии с использованием метода фазового сдвига оказались надежным методом с точностью порядка 1 \AA [1]. Однако эти методы хорошо работают только при соблюдении строгих лабораторных условий измерений, при этом используемые системы являются дорогими, требующего большого количества оптического компонента, тщательной юстировки и калибровки.

Более экономичное и компактное решение для измерения смещения может быть получено с использованием оптической интерферометрии с обратной связью (optical feedback interferometry – OFI), также известной как самосмешивающиеся интерферометрия (self-mixing interferometry SMI). В OFI свет, рассеянный обратно от движущейся мишени, вновь попадает в резона-

тор лазера, вызывая модуляцию оптической выходной мощности (ОВМ) лазера [2]. Интенсивности лучей напрямую связаны с изменениями длины оптического пути от лазера до мишени. Одна из первых математических моделей для OFI описана в классической работе Ланга и Кобаяси [3], где модуляция объясняется в терминах электрического поля. В более поздних моделях, представленной в [4], в котором используется двухрезонаторный Фабри – Перо резонатор, описываются эффекты коэффициента связи (С) и коэффициента усиления ширины линии (α) в ОВМ лазерного диода.

В последние годы были предложены различные конструктивные методы для достижения высокой точности в нано-масштабе [5-19]. В 2007 году Ченг предложил оригинальный метод улучшения разрешения измерений до $\lambda/34$ [8]. Однако требуемую отражающую и пропускающую способности мишени трудно достичь при практическом исполнении. В 2013 году Вонг и другие использовали внешнее зеркало, чтобы достигнуть предельной точности $\lambda/6$ [9]. Теоретически, точность полосы может быть легко улучшена путем увеличения времени отражения. Однако время отражения ограничено расстоянием между внешним зеркалом и измеряемым объектом. Основываясь на методе множественных отражениях, Гуо и др. предложили интерферо-

метр решёточного самосмещения с автоколлимационной конструкцией [10]. Этот метод имеет существенные преимущества, заключающиеся в исключении обратной связи дифракционного пучка нулевого порядка и получении точности в несколько нанометров. На практике, поверхность измеряемой цели должна быть прикреплена с помощью решетки, а углу падения луча лазера должен соответствовать особым требованиям. В 2013 году Тан и другие также предложили метод, который сочетает в себе лазер со смещенной по частоте обратной связью и осевую позиционную способность конфокальной микроскопии, чтобы улучшить его осевое разрешение до 2 нм, в условиях неоднозначности диапазона около десяти микрон [11]. В 2015 году Зенг и другие в своей работе использовали улучшенный метод многократного отражения, основанный на единичных эффектах обратной связи с ортогональной поляризацией высокого порядка, который улучшил точность полосы до $\lambda/58$ [12].

Одной из новейших разработок в области лазерной интерферометрии в нанодиапазоне является работа Вей и др. [15], в котором предложен быстрый алгоритм с равномерной мощностью, что позволяет достигать нанометровой точности без добавления каких-либо оптических компонентов. Быстрый алгоритм четной мощности может теоретически улучшить точность полосы до $\lambda/(2^{n+3})$, когда сигнал SMI имеет хотя бы одну полную полосу. Однако сигнал будет с шумом,

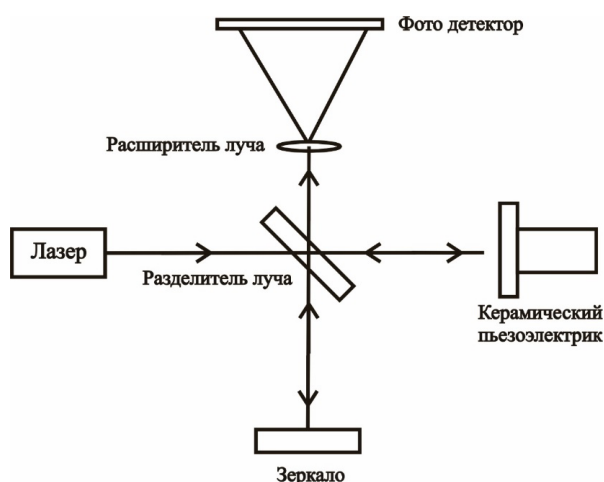


Рисунок 1 – Структурно-функциональная схема лазерной измерительной системы

если амплитуда намного меньше значения $\lambda/2$. Следовательно, быстрый алгоритм четной мощности будет не практичным, поскольку сигнал не может быть хорошо нормализован. На основе вышеизложенного в работе [16] авторы развивают интегрированную методику измерения, комбинируя быстрый алгоритм с четной мощностью с методикой множественного отражения для улучшения измерения вибрации в наноразмерной величине.

Учитывая вышеизложенное на сегодняшний день, разработка лазерной измерительной системы для измерения линейных перемещений в нанодиапазоне являются весьма актуальной для практического применения. В настоящей статье рассматривается метод измерения колебания и смещения пьезоэлектрика с помощью лазерной измерительной системы, основанной на интерферометрии А. Майкельсона.

Эксперимент и обсуждение

Лазерная измерительная система представляет собой структуру из источника лазерного излучения, оптических элементов (разделителя луча, зеркал, расширителя луча), фотодетектора и керамического пьезоэлектрика. Структурно-функциональная схема лазерной измерительной системы аналогична ранее представленной структуре в работе [20] и показана на рисунке 1.

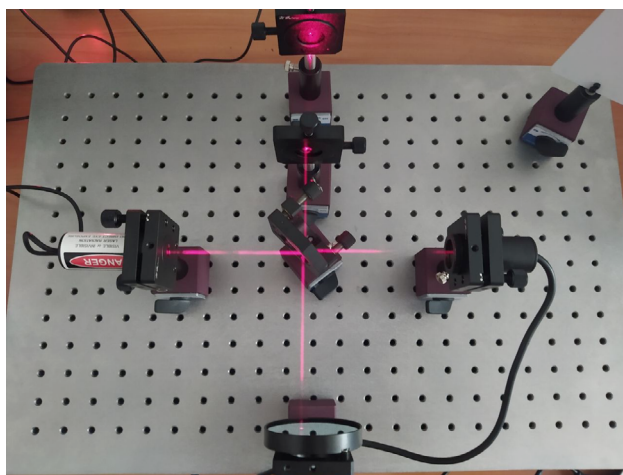


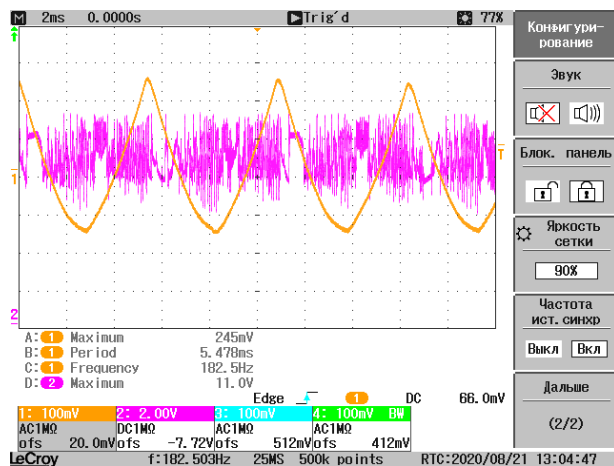
Рисунок 2 – Лазерная измерительная система в рабочей платформе

В качестве источника света используется полупроводниковый диодный лазер с длиной волны 650 нм и мощностью 4 мВт. Лазерный луч попадая на разделитель луча делится на два, один луч направляется в опорное зеркало отражается, второй луч направляется в измерительное зеркало – керамический пьезоэлектрик с источником питания, который используется в качестве второго анализатора сигнала и подключается к осциллографу. Далее два луча через разделитель направляются в расширитель луча и попадают на фотодетектор, который также подключен к цифровому осциллографу.

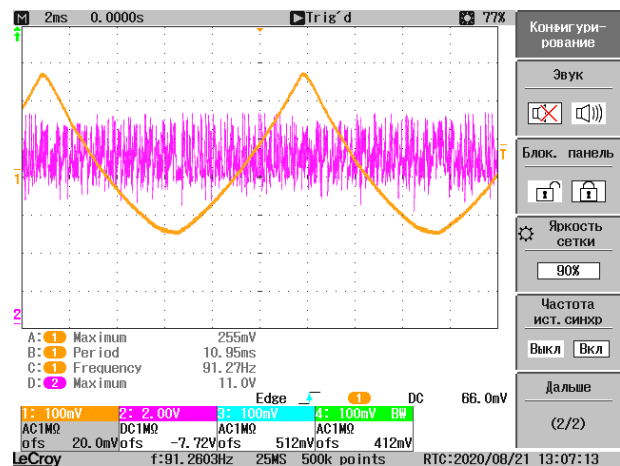
Разработанная лазерная измерительная система работает по принципу интерферометра А.

Майкельсона. Рабочая станция лазерной измерительной системы представлена на рисунке 2.

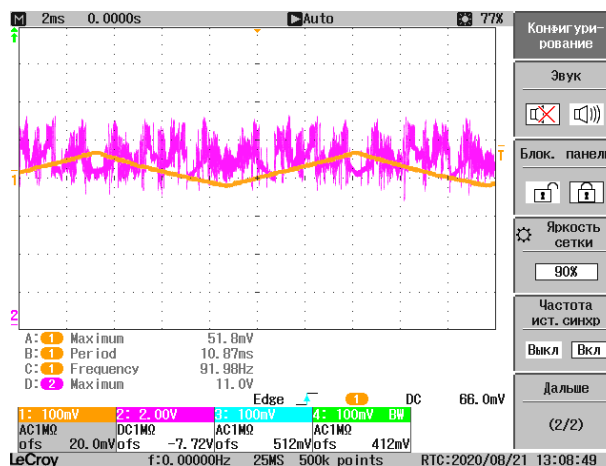
На рисунке 3 представлены осциллограммы сигналов колебания пьезоэлектрика (желтый) и фотодетектора (розовый), полученные при различных значениях параметрах сигнала пьезоэлектрика. Учитывая, что в процессе измерения существуют ряд неконтролируемых причин, влияющие на чувствительность лазерной измерительной системы, такие как механические, акустические и микросейсмические колебания, время измерения было увеличено до 25мс с регистрацией 500 тыс. точек для использования и анализа результатов долговременных измерений.



а) – размах амплитуды 5В, частота сигнала 182,5 Гц



б) – размах амплитуды 5В, частота сигнала 91,27 Гц



в) – размах амплитуды 1В, частота сигнала 91,98 Гц

Рисунок 3 – Осциллограмма колебания сигналов пьезоэлемента и фотодатчика, полученных с помощью лазерной измерительной системы

Из рисунка видно, что изменение размаха амплитуды и частоты вибросигнала керамического пьезоэлектрика приводит к ответному изменению формы регистрируемого сигнала фотодетектора. При этом, как показывает осциллограмма сигнала фотодетектора, во всех случаях, колебание остается постоянным вокруг 8-9В с максимумом в 11В. Обнаружено, что понижение частоты колебания пьезоэлектрика стабилизирует сигнал фотодетектора (рис. 3б), а дальнейшее уменьшение его размаха амплитуды приводит к уменьшению его частоты (рис. 3в). Таким образом можно заметить, что при колебании пьезоэлектрика в сравнительно высоких значениях частоты и амплитуды воздействие акустических и микросейсмических шумов, а также шумов от самого фотодетектора становится более выраженным в сигналах

фотодетектора, что усложняет процесс анализа измерения нано- и микросмещении пьезоэлектрика. Для того, чтобы убрать нежелательные шумы из сигнала фотодетектора и удобно выделять низкочастотную кинематическую составляющую разности фаз $\varphi(t)$ и искомого смещения пьезоэлектрика использует фильтрации. Для расчета зависимости смещения подвижного зеркала (пьезоэлектрика) от времени использовался фильтр Баттерворта с частотной характеристикой:

$$H(f) = \frac{1}{1 + \left(\frac{f}{f_c}\right)^n}, \quad (1)$$

где f – частота, f_c – частота среза, а n – порядок фильтра, определяющий ширину переходной полосы.

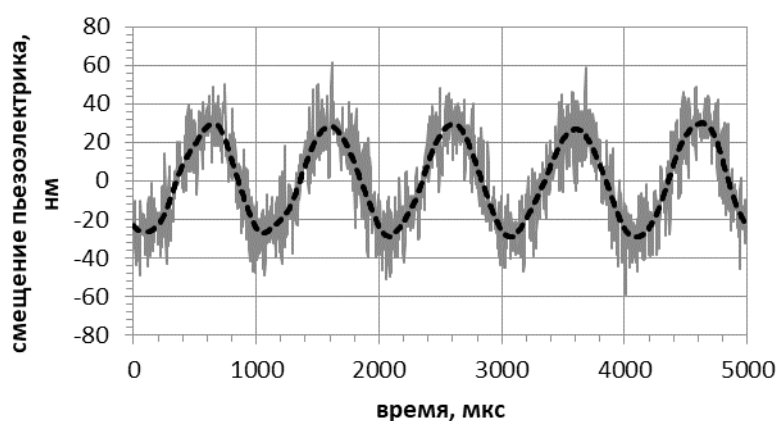


Рисунок 4 – Рассчитанная зависимость смещения пьезоэлектрика по времени

На рисунке 4 представлена временная зависимость смещения пьезоэлектрика. Обнаружено, что при определенном подборе параметров фильтра удастся не только подавить гармонику двойной несущей частоты, но и эффективно убрать шумы измерительной системы, наложенные на полезный сигнал.

Вывод

Таким образом, в настоящей работе представлены результаты измерения колебания пьезоэлектрика с помощью лазерной измерительной системы, работающей по принципу интерферометра А. Майкельсона. Установлено, что изменение показателей вибросигнала

керамического пьезоэлектрика приводит к изменению формы сигнала фотодетектора. Для стабилизации сигнала фотодетектора и снижения воздействия различных шумов, в том числе шумов от самого фотодетектора необходимо понижение частоты и амплитуды колебания пьезоэлектрика, а также использование различных расчетных фильтрации для определения зависимости смещения пьезоэлектрика от времени.

Благодарность

Данная работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Республики Казахстан в рамках гранта AP05133211.

Литература

- 1 Bergamin A., Cavagnero G., and Mana G. A displacement and angle interferometer with subatomic resolution // *Rev. Sci. Instrum.* – Aug. 1993. – Vol. 64, No. 11. – P. 3076–3081.
- 2 Wang W.M., Boyle W.J.O., Grattan K.T.V., and Palmer A.W. Self-mixing interference in a diode laser: Experimental observations and theoretical analysis // *Appl. Opt.* – Mar. 1993. – Vol. 32, No. 9. – P. 1551–1558.
- 3 Lang R., and Kobayashi K. External optical feedback effects on semiconductor injection laser properties // *IEEE J. Quantum Electron.* – Mar. 1980. – Vol. 16, No. 3. – P. 347–355.
- 4 Wang W.M., Grattan K.T.V., Palmer A.W., and Boyle W.J.O. Self-mixing interference inside a single-mode diode laser for optical sensing applications // *J. Lightwave Technol.* – Sep. 1994. – Vol. 12, No. 9. – P. 1577–1587.
- 5 Donati S., and Norgia M. Self-mixing interferometry for biomedical signals sensing, // *IEEE J. Sel. Topics Quantum Electron.* – Apr. 2014. – Vol. 20, No. 2. – P. 104–111.
- 6 Zhu K.Y., Guo B., Lu Y.Y., Zhang S.L., and Tan Y.D. Single-spot two-dimensional displacement measurement based on self-mixing interferometry // *Optica.* – Jul. 2017. – Vol. 4, No. 7. – P. 729–735.
- 7 Fei L.G., and Zhang S.L. The discovery of nanometer fringes in laser self-mixing interference // *Opt. Commun.* – Dec. 2006. – Vol. 273. – P. 226–230.
- 8 Cheng X., and Zhang S.L. Intensity modulation of VCSELs under feedback with two reflectors and self-mixing interferometer // *Opt. Commun.* – Apr. 2007. – Vol. 272, No. 2. – P. 420–424.
- 9 Wang L., Luo X., Wang X.L., and Huang W.C. Obtaining High Fringe Precision in Self-Mixing Interference Using a Simple External Reflecting Mirror. // *IEEE Photonics Journal.* – Jun. 2013. – Vol. 5, No. 3.
- 10 Guo D.M., Shi L.H., Yu Y.G., Xia W., and Wang M. Micro-displacement reconstruction using a laser self-mixing grating interferometer with multiple-diffraction // *Opt. Express.* – Dec. 2017. – Vol. 25, No.25. – P. 31394–31406.
- 11 Tan Y.D., Wang W.P., Xu C.X., and Zhang S.L. Laser confocal feedback tomography and nano-step height measurement // *Scientific Reports.* – Oct. 2013 – Vol. 3, Art. ID. 2971.
- 12 Zeng Z.L., Qu X.M., Tan Y.D., Tan R.T., and Zhang S.L. High-accuracy self-mixing interferometer based on single high-order orthogonally polarized feedback effects // *Opt. Exp.* – Jun. 2015. – Vol. 23, No. 13. – P. 16977–16983.
- 13 Azcona F.J., Atashkhoeei R., Royo S., Astudillo J.M., and Jha A. A nanometric displacement measurement system using differential optical feedback interferometry // *IEEE Photo. Tech. Lett.* – Nov. 2013. – Vol. 25, No. 21. – P. 2074–2077.
- 14 Huang Z., Li C.W., Li S.Q., and Li D.Y. Equivalent wavelength self-mixing interferometry for displacement measurement // *Appl. Opt.* – Sep. 2016., – Vol. 55, No. 25. – P. 7120–7125.
- 15 Wei Z., Huang W.C., Zhang J., Wang X.L., Zhu H.L., An T., and Yu X. Obtaining scalable fringe precision in self-mixing interference using an even-power fast algorithm, // *IEEE Photonics Journal.* – Aug. 2017. – Vol. 9, No. 4. – Art. ID.6803211.
- 16 Sun H., Zhang Y., Chen H., Xiong Y., Huang W., Wang X., and Xu H. Large-range nanoscale self-mixing interferometer based on multiple reflections and Even-power Fast Algorithm // *Optics Communications.* – 15 July 2019. – Vol. 443. – P. 160–165.
- 17 Michelson A.A. On the Correction of Optical Surfaces // *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America.* – 1918. – Vol. 4, No. 7. – P. 210–212.
- 18 Bluestein L.I. A linear filtering approach to the computation of the discrete Fourier transform // *Northeast Electronics Research and Engineering Meeting Record.* – 1968. – Vol. 10. – P.218–219.
- 19 Bianchi G., and Sorrentino R. Electronic filter simulation & design. // *McGraw-Hill Professional* – 2007. – 606 p.
- 20 Аханова Н.Е., Дарзбек С.А., Желкобаев Я.Э., Габдуллин М.Т., Ерланулы Е., Багрышев Д.Г. Разработка системы измерения в нанодиапазоне // *Вестник КазНУ, серия физическая.* – 2018. – Vol. 66, №3. – P.69-74..

References

- 1 A. Bergamin, G. Cavagnero, and G. Mana, *Rev. Sci. Instrum.*, 64 (11), 3076-3081 (1993).
- 2 W.M. Wang, W.J.O. Boyle, K.T.V. Grattan, and A.W. Palmer, *Appl. Opt.*, 32 (9), 1551-1558 (1993).
- 3 R. Lang, and K. Kobayashi, *IEEE J. Quantum Electron.*, 16 (3), 347–355 (1980).
- 4 W.M. Wang, K.T.V. Grattan, A.W. Palmer, and W.J.O. Boyle, *J. Lightwave Technol.*, 12 (9), 1577-1587 (1984).
- 5 S. Donati and M. Norgia, *IEEE J. Sel. Topics Quantum Electron.*, 20 (2), 104-111 (2014).
- 6 K.Y. Zhu, B. Guo, Y.Y. Lu, S.L. Zhang, and Y.D. Tan, *Optica*, 4 (7), 729-735 (2017).
- 7 L.G. Fei and S.L. Zhang, *Opt. Commun.*, 273, 226-230 (2006).
- 8 X. Cheng and S.L. Zhang, *Opt. Commun.*, 272 (2), 420-424 (2007).
- 9 L. Wang, X. Luo, X.L. Wang, and W.C. Huang, *IEEE Photonics Journal*, 5 (3) (2013).
- 10 D.M. Guo, L.H. Shi, Y.G. Yu, W. Xia, and M. Wang, *Opt. Express*, 25 (25), 31394-31406 (2017).
- 11 Y.D. Tan, W.P. Wang, C.X. Xu, and S.L. Zhang, *Scientific Reports.*, 3:2971 (2013).
- 12 Z.L. Zeng, X.M. Qu, Y.D. Tan, R.T. Tan, and S.L. Zhang, *Opt. Exp.*, 23 (13), 16977-16983 (2015).

- 13 F.J. Azcona, R. Atashkooei, S. Royo, J.M. Astudillo, and A. Jha, IEEE Photo. Tech. Lett., 25 (21), 2074-2077 (2013).
- 14 Z. Huang, C.W. Li, S.Q. Li, and D.Y. Li, Appl. Opt., 55 (25), 7120-7125 (2016).
- 15 Z. Wei, W.C. Huang, J. Zhang, X.L. Wang, H.L. Zhu, T. An, and X. Yu, IEEE Photonics Journal, 9 (4):6803211 (2017).
- 16 H. Sun, Y. Zhang, H. Chen, Y. Xiong, W. Huang, X. Wang, and H. Xu, Optics Communications, 443, 160-165 (2019).
- 17 A.A. Michelson, Proc. of the National Academy of Sciences of the United States of America, 4 (7), 210-212 (1918).
- 18 L.I. Bluestein, Northeast Electronics Research and Engineering Meeting Record, 10, 218-219 (1968).
- 19 G. Bianchi and R. Sorrentino, McGraw-Hill Professional, 2007, p.606.
- 20 N.E. Akhanova, S.A. Darznez, J.E. Zhelkobaev, M.T. Gabdullin, Ye. Yerlanuly, and D.G. Batryshev, Recent Contributions to Physics, 66 (3), 69-74 (2018). (in Russ)

МАЗМҰНЫ – CONTENTS – СОДЕРЖАНИЕ

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
<i>Жусупов М.А., Жаксыбекова К.А., Кабатаева Р.С., Копенбаева А.С.</i> Спектр возбуждения ядра ^{10}B при захвате реальных и виртуальных α -частиц..... 4		
<i>Folomeev V., Kleihaus B., Kunz J.</i> Mixed star-plus-wormhole systems with a complex scalar field..... 10		
<i>Көмеш Т., Манапбаева А.Б., Есимбек Ж., Алимгазина Н.Ш., Кызгарина М.Т., Қуанбек Б.</i> Интерпретация радиоастрономических наблюдений H_2CO и $\text{H}110\alpha$ в областях звездообразования W40 и Serpens South молекулярного облака Aquila..... 19		
2-бөлім Плазма физикасы	Section 2 Plasma Physics	Раздел 2 Физика плазмы
<i>Темирбек А.М., Муратов. М.М., Габдуллин М.Т., Рамазанов Т.С.</i> Влияние квантовой нелокальности и электронной неидеальности на длину рассеяния электрона на атоме гелия в плотной плазме..... 30		
3-бөлім Конденсирленген күй физикасы және материалтану проблемалары. Наноғылым	Section 3 Condensed Matter Physics and Materials Science Problems. Nanoscience	Раздел 3 Физика конденсированного состояния и проблемы материаловедения. Нанонаука
<i>Paskalov G., Jarvis R., Adjarova L., Benova E., and B. Harmison</i> Porous Material Interactions with RF plasma..... 38		
<i>Аубакирова Д.М., Ердыбаева Н.К., Пичугин В.Ф.</i> Исследование состава пленок оксидов титана, осажденных методом реактивного магнетронного распыления 43		
<i>Опахай С., Кутербеков К.А., Нуркенов С.А.</i> Металл тіреуіші негізіндегі қатты оксидті отын элементтері үшін NiAl интерметалдық қосылысының синтезі..... 49		
<i>Мұсабек Г.Қ. Ермұхамед Д., Бақтыгерей С.З., Асилбаева Р.Б., Қалимолдаев М.Н., Амирханова Г.А., Сиваков В.</i> Жарық ынталандырған сутегі генерациясында кремний нанокұрылымдарын қолданудың артылықшылықтары мен болашағы..... 61		
<i>Жуков В.В., Идрисова Т.К., Мукашев К.М., Мурадов А.Д., Садыков Т.Х., Садуев Н., Умаров Ф.Ф. Шенетов А.Л.</i> Акустические сигналы, связанные с прохождением проникающего космического излучения через сейсмически напряженную среду 75		
<i>Аханова Н.Е., Ерланулы Е., Дарзбек С.А., Батрышев Д.Г.</i> Изучение колебания пьезоэлектрика с помощью лазерной измерительной системы..... 84		