ISSN 1563-0315; 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

№4 (75)

Алматы «Қазақ университеті» 2020

### ISSN 1563-0315; eISSN 2663-2276



ХАБАРШЬ

ФИЗИКА СЕРИЯСЫ №4 (75) желтоқсан



04.05.2017 ж. Қазақстан Республикасының Ақпарат және коммуникация министрлігінде тіркелген

# Куәлік № 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) Аскарова Ә.С., ф.-м.ғ.д., профессор (Қазақстан) Буртебаев Н., ф.-м.ғ.д., профессор (Қазақстан) Алдияров А.У., 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.



Компьютерде беттеген Айгүл Алдашева

© 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

## МРНТИ 29.05.23

https://doi.org/10.26577/RCPh.2020.v75.i4.01



<sup>1</sup>Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Казахстан, г. Алматы <sup>2</sup>Институт физики им. академика Ж. Жеенбаева, Национальная академия наук Кыргызской Республики, Кыргызстан, г. Бишкек \*e-mail: tlemissov-ozzy@mail.ru

# ГЛЮОННЫЕ ТРУБКИ В НЕАБЕЛЕВОЙ ТЕОРИИ ПРОКА + СКАЛЯРНОЕ ПОЛЕ ХИГГСА

Рассматривается неабелева теория Прока + скалярное поле Хиггса, возможно являющаяся некоторым приближением для квантовой хромодинамики. В лагранжиане этой теории предложены массовое слагаемое и слагаемое, описывающее взаимодействие между Прока полем и скалярным полем Хиггса. В SU(3) неабелевой теории Прока + скалярное поле Хиггса получены цилиндрически – симметричные решения (глюонные трубки), в которых имеется продольное неабелево электрическое поле, приводящие к потоку электрического поля вдоль трубки. Это поле создается кварками, расположенными на ±∞ и, вследствие сильного нелинейного взаимодействия между полями, оно сосредоточено в конечной области вблизи центра трубки. Соответствующие уравнения решены численным способом как нелинейная задача на собственные значения, где собственными значениями являются массы скалярного и Прока полей. Показано, что калибровочные потенциалы, напряженности полей, а также плотность энергии падают по экспоненциальному закону на пространственной бесконечности, что приводит к конечному потоку продольного электрического поля через трубку, а также к конечной линейной плотности энергии, сосредоточенной в этой трубке. Получен энергетический спектр решений в зависимости от величины параметров, определяющих решения.

Ключевые слова: Неабелевая теория Прока, плотность энергии, спектр энергии

V. Dzhunushaliev<sup>1,2</sup>, A. Tlemissov<sup>1\*</sup>, V. Folomeev<sup>1,2</sup> <sup>1</sup>Al-Farabi Kazakh National University, Kazakhstan, Almaty <sup>2</sup>Academician Zh. Zheenbaev Institute of Physics, National Academy of Sciences of the Kyrgyz Republic, Kyrgyzstan, Bishkek \*e-mail: Tlemissov-Ozzy@mail.ru

#### Gluon tubes in the non-Abelian theory of Proca + scalar Higgs field

The non-Abelian Proca theory + scalar Higgs field is considered, possibly being some approximation for quantum chromodynamics. In the Lagrangian of this theory, a mass term and a term describing the interaction between the Proca field and the scalar Higgs field are proposed. In SU (3) of the non-Abelian Proca + scalar Higgs field, cylindrically symmetric solutions (gluon tubes) are obtained, in which there is a longitudinal non-Abelian electric field, leading to an electric field flow along the tube. This field is created by quarks located at  $\pm \infty$  and, due to the strong nonlinear interaction between the fields, it is concentrated in a finite region near the center of the tube. The corresponding equations are solved numerically as a nonlinear eigenvalue problem, where the eigenvalues are the masses of the scalar and Proca fields. It is shown that gauge potentials, field strengths, and energy density fall exponentially at spatial infinity, which leads to a finite flux of a longitudinal electric field through the tube, as well as to a finite linear energy density concentrated in this tube. The energy spectrum of solutions is obtained depending on the values of the parameters that determine the solutions.

Key words: non-Abelian theory of Proca, energy density, energy spectrum

В. Джунушалиев<sup>1,2</sup>, А. Тлемисов<sup>1\*</sup>, В. Фоломеев<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Қазақстан, Алматы қ. <sup>2</sup>Академик Ж.Жеенбаев атындағы Физика институты, Қырғыз Республикасының Ұлттық ғылым академиясы, Қырғызстан, Бішкек қ. \*e-mail: Tlemissov-Ozzy@mail.ru

### Абелдік емес Прока теориясындағы + скалярлық Хиггс өрісінің глюон түтіктері

Абелдік емес Прока теориясы + скалярлық Хиггс өрісі кванттық хромодинамика үшін жуықтау болу ықтималдығы көп болғандықтан қарастырылады. Осы теорияның лагранжианында Прока өрісі мен скаляр Хиггс өрісі арасындағы өзара әрекеттесуді сипаттайтын мүше және массалық мүше ұсынылған. SU (3) Абельдық емес Прока + Скаляр Хиггс өрісінің цилиндрліксимметриялы шешімдері (глюон түтіктері) алынады, оларда Абельдық емес бойлық электр өрісі бар, ол түтік бойымен электр өрісінің ағынына әкеледі. Бұл өріс ± ∞ қашықтықта орналасқан кварктар арқылы құрылады және өрістер арасындағы күшті сызықтық емес өзара әрекеттесудің арқасында ол түтіктің центріне жақын шекті аймақта шоғырланған. Сәйкес теңдеулер сызықты емес өздік мәнді табу арқылы сандық түрде шешіледі, мұндағы өздік мәндер ретінде скалярлық және Прока өрістерінің массалары қарастырылады. Калибрлік потенциалы, өрістің кернулігі және энергия тығыздығы кеңістік шексіздігінде экспоненциалды түрде төмендейтіні көрсетілген, бұл түтік арқылы бойлық электр өрісінің ағынына, сондай-ақ осы түтікте шоғырланған сызықтық энергия тығыздығына әкеледі. Параметрлер өлшемдерінен тәуелді, шешімдерді анықтайтын энергетикалық спектр алынды.

Түйін сөздер: Проканың Абельдік емес теориясы, энергия тығыздығы, энергия спектрі

# Введение

Под теориями Прока подразумеваются калибровочные теории (как абелевы, так и неабелевы), в которых калибровочная инвариантность явно нарушается введением массового члена. Первое использование поля Прока было сделано Юкавой для описания пионов. Позже теория Прока нашла применение в различных областях современной физики. Использование данной теории приводит к следующим последствиям: фотон приобретает массу покоя; гравитация Эйнштейна-Прока включает гравитон ненулевой массы покоя; теории Эйнштейна-Прока-Вейля могут применяться для описания темной материи [1]; используя реальное поле Прока с квадратом отрицательной массы, можно описать тахионы-частицы, движущиеся со скоростью света [2,3].

Кроме того, можно отметить следующие исследования с участием теории Прока. В ссылке [4] изучается неабелева теория

Прока-Эйнштейна в асимптотически антиде-Ситтеровском пространстве-времени с калибровочной группы SU(2). Полученные результаты описывают гравитирующий монополь Прока. В работах [5,7] и [8] рассматриваются звезды, поддерживаемые полями Прока. В статях [9-11] описывается эффект Казимира с учетом массивных фотонов и рассчитывается верхний предел масс самих фотонов. В работе [12] исследуется теории обобщенного поля Прока: построено обобщенное действие Прока для векторного поля с производными самовзаимодействиями только с тремя распространяющими степенями свободы. В статье [12] также рассматривается обобщенное действие Прока для абелева векторного поля. В работе [13] рассматривается релятивистская квантовая механика частицы Прока в римановых пространствах-временах. В работе [14] авторы наложили наблюдательные ограничения на класс моделей темной энергии в рамках обобщенных теории Прока.

В теориях сильных взаимодействий имеется несколько сложных проблем, которые не имеют аналога в классических теориях, а являются чисто квантовыми явлениями. К ним относятся, например, проблемы конфайнмента, массовой щели [15-17], а также проблема спина протона, заключающаяся в том, что экспериментально установленный суммарный спин кварков, антикварков и глюонов составляет от 0 до 40% от спина протона при высоких энергиях [18]. В 1988 году в ходе экспериментов по измерению величины спина протона [19] выяснилось, что суммарный вклад спинов трех кварков в спин протона незначителен. В настоящее время существует ряд различных подходов к решению этих проблем. Например, в работе [20] представлены решеточные вычисления в рамках квантовой хромодинамики (КХД), в которых изучался спин протона. В работе [21] приводятся аргументы в пользу того, что ответ на "спиновый кризис" можно найти в фундаментальных непертурбативных свойствах вакуума КХД.

В данной работе мы показываем, что в SU(3) неабелевой теории Прока (в теории Янга-Миллса с явно нарушенной калибровочной симметрией) [22], включающей скалярное поле Хиггса, имеются цилиндрически – симметричные (трубчатые) решения, которые необходимы для объяснения природы конфайнмента в КХД. Будут получены решения, зависящие от свободных параметров системы, что позволит построить энергетический спектр для линейной плотности энергии таких глюонных трубок. Этот результат говорит в пользу того, что неабелевые теории Прока могут быть использованы в качестве некоторого приближения в КХД.

#### Уравнения для потоковой трубки

Лагранжиан SU(3) теории Прока-Хиггса выглядит следующим образом [23-24]:

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4} F^{a}_{\mu\nu} F^{a\mu\nu} - \frac{(\mu^{2})^{ab,\mu}_{\nu}}{2} A^{a}_{\mu} A^{b\nu} + \frac{1}{2} \partial_{\mu} \phi \partial^{\mu} \phi + \frac{\lambda}{2} \phi^{2} A^{a}_{\mu} A^{a\mu} -$$
(1)

$$-\frac{\lambda}{4}(\phi^2-M^2)^2.$$

Здесь тензор напряженности  $F_{\mu\nu}^{a}$  определен через калибровочный (цветовой) 4-потенциал  $A_{\mu}^{a}$  как  $F_{\mu\nu}^{a} = \partial_{\mu}A_{\nu}^{a} - \partial_{\nu}A_{\mu}^{a} + gf_{abc}A_{\mu}^{b}A_{\nu}^{c}$ ;  $f_{abc}$  – структурные константы SU(3) группы, a =1,2,3...8;  $M, \lambda, \Lambda, (\mu)_{\nu}^{ab,\mu}$  – константы теории, g – константа связи цветовых полей. Отметим, что слагаемое  $\frac{1}{2}(\mu^{2})_{\nu}^{ab,\mu}A_{\mu}^{a}A^{b\nu}$  явно нарушает калибровочную симметрию в исследуемой теории, в отличие от теорий Вайнберга-Салама, где симметрия нарушается спонтанно.

После варьирования действия с лагранжианом (1) по  $A^a_{\mu}$  и  $\phi$ , получаем следующие полевые уравнения:

$$\mathcal{D}_{\nu}F^{a\mu\nu} = \lambda\phi^2 A^{a\mu},\tag{2}$$

$$\partial_{\mu}\partial^{\mu}\phi = \lambda A^{a}_{\mu}A^{a\mu} - (\mu^{2})^{ab,\mu}_{\nu}, \qquad (3)$$

где ковариантная производная определяется как  $\mathcal{D}_{\nu} = (\partial_{\nu} + g f_{abc}) A_{\nu}^{b}$ . Выражение для плотности энергии имеет вид

$$\varepsilon = \frac{1}{2} (E_i^a)^2 + \frac{1}{2} (H_i^a)^2 - \left[ (\mu^2)_0^{ab,\alpha} A_\alpha^a A_0^b - \frac{1}{2} (\mu^2)_\beta^{ab,\alpha} A_\alpha^a A^{b\beta} \right] + \frac{1}{2} (\partial_t \phi)^2 + \frac{1}{2} (\nabla \phi)^2 + \lambda \phi^2 \left[ (A_0^a)^2 - \frac{1}{2} A_\alpha^a A^{a\alpha} \right] + \frac{\Lambda}{4} (\phi^2 - M^2)^2.$$
(4)

Анзацы для компонент потенциала  $A^a_{\mu}$  и скалярного поля  $\phi$  выбираем в виде [25]

$$A_t^2(\rho) = \frac{h(\rho)}{g}, A_z^5(\rho) = \frac{v(\rho)}{g}, \phi(\rho) = \phi(\rho).$$
(5)

Тогда выражения для компонент электрического и магнитного полей будут

$$E_{\rho}^{2} = -\frac{h\nu}{g}, E_{Z}^{7} = \frac{h\nu}{2g}, H_{\varphi}^{5} = -\frac{\rho\nu\nu}{g}, \qquad (6)$$

где штрих обозначает производную по радиальной координате  $\rho$ . При подстановке (5) в (2) и (3) получим следующую систему дифференциальных уравнений, записанных в цилиндрической системе координат  $t, z, \rho, \varphi$ :

$$h'' + \frac{h'}{\rho} = h\left(\frac{v^2}{4} + \lambda\phi^2 - \mu_1^2\right),$$
 (7)

$$v'' + \frac{v}{\rho} = v \left( -\frac{h^2}{4} + \lambda \phi^2 - \mu_2^2 \right),$$
 (8)

$$\phi'' + \frac{\phi}{\rho} = \phi \left[ \frac{\lambda}{g^2} (-h^2 + v^2) + \lambda (\phi^2 - M^2) \right].$$
(9)

Вводя безразмерные величины  $\tilde{\phi} = \phi \sqrt{\lambda} / \phi(0), \tilde{v} = v / \phi(0), \tilde{h} = h / \phi(0), \tilde{M} = M \sqrt{\lambda} / \phi(0), \tilde{h} = h / \phi(0), \tilde{M} = M \sqrt{\lambda} / \phi(0), \tilde{h} = h /$ 

 $\phi(0), \tilde{\nu} = \nu/\phi(0), \tilde{n} = n/\phi(0), M = M\sqrt{\lambda}/\phi(0), \tilde{\lambda} = \lambda/g^2, \tilde{\Lambda} = \Lambda/\lambda, \tilde{\mu}_{1,2} = \mu_{1,2}/\phi(0), x = \rho\phi(0),$  уравнения (7)-(9) примут вид

$$\widetilde{h}^{\prime\prime} + \frac{\widetilde{h}^{\prime}}{x} = \widetilde{h} \left( \frac{\widetilde{v}^2}{4} + \widetilde{\phi}^2 - \widetilde{\mu}_1^2 \right), \qquad (10)$$

$$\widetilde{v} + \frac{\widetilde{v}'}{x} = \widetilde{v} \left( -\frac{\widetilde{h}^2}{4} + \widetilde{\phi}^2 - \widetilde{\mu}_2^2 \right), \quad (11)$$

$$\widetilde{\phi}^{\prime\prime} + \frac{\widetilde{\phi}}{x} = \widetilde{\phi} \left[ \widetilde{\lambda} \left( -\widetilde{h}^2 + \widetilde{v}^2 \right) + \widetilde{\lambda} \left( \widetilde{\phi}^2 - \widetilde{M}^2 \right) \right], (12)$$

а плотность энергии (4) в безразмерном виде будет

$$g^{2}\tilde{\varepsilon} \equiv \frac{g^{2}\varepsilon}{\phi^{4}(0)} = \frac{(\tilde{h}\prime)^{2}}{2} + \frac{(\tilde{\nu}\prime)^{2}}{2} + \frac{(\tilde{\nu}\prime)^{2}}{2} + \frac{\tilde{\mu}_{1}^{2}}{2\tilde{\lambda}} - \frac{\tilde{\mu}_{1}^{2}}{2}\tilde{h}^{2} - \frac{\tilde{\mu}_{2}^{2}}{2}\tilde{\nu}^{2} + \frac{1}{2}\tilde{\phi}^{2}\left(\tilde{h}^{2} + \tilde{\nu}^{2}\right) + \frac{\tilde{\lambda}}{4\tilde{\lambda}}\left(\tilde{\phi}^{2} - \tilde{M}^{2}\right)^{2}.$$
(13)

# Численные расчеты

Система уравнений (10)-(12) решается как нелинейная задача на собственные значения  $\tilde{\mu}_{1,2}, \tilde{M}$  и собственные функции  $\tilde{h}, \tilde{v}, \phi$ . В силу того, что в этих уравнениях имеются слагаемые  $\tilde{h}/x, \tilde{v}/x$  и  $\phi/x$ , численное решение необходимо стартовать не из x = 0, а из точки  $x = \delta \ll 1$ . Для задания граничных условий для функций  $\tilde{h}$ ,  $\tilde{v}$  и  $\phi$  их необходимо разложить в ряд Тэйлора в окрестности начала координат:

$$\tilde{h}(x) = \tilde{h}_0 + \tilde{h}_2 \frac{x^2}{2} + \cdots,$$
 (14)

$$\tilde{v}(x) = \tilde{v}_0 + \tilde{v}_2 \frac{x^2}{2} + \cdots,$$
 (15)

$$\widetilde{\phi}(x) = \widetilde{\phi}_0 + \widetilde{\phi}_2 \frac{x^2}{2} + \cdots.$$
(16)

Далее, после подстановки (14)-(16) в систему уравнений (10)-(12), получаем следующие выражения для коэффициентов разложения:

$$\tilde{h}_{2} = \frac{\tilde{h}_{0}}{2} \left( \frac{\tilde{\nu}_{0}^{2}}{4} - \tilde{\phi}_{0}^{2} - \tilde{\mu}_{1}^{2} \right),$$
(17)

$$\tilde{v}_2 = \frac{\tilde{v}_0}{2} \left( -\frac{\tilde{h}_0^2}{4} + \tilde{\phi}_0 - \tilde{\mu}_2^2 \right),$$
 (18)

$$\tilde{\phi}_2 = \frac{\phi_0}{2} \Big[ \lambda \left( -\tilde{h}_0^2 + \tilde{v}_0^2 \right) + \tilde{\Lambda} \left( \tilde{\phi}_0^2 - \tilde{M}^2 \right) \Big].$$
(19)

Соответственно граничные условия задаются в виде

$$\widetilde{h}(\delta) = \widetilde{h}_0 + \widetilde{h}_2 \frac{\delta^2}{2}, \quad \widetilde{h}'(\delta) = h_2 \delta, \quad (20)$$

$$\widetilde{v}(\delta) = v_0 + v_2 \frac{\delta^2}{2}, \widetilde{v}'(\delta) = v_2 \delta,$$
 (21)

$$\tilde{\phi}(\delta) = \phi_0 + \phi_2 \frac{\delta^2}{2}, \quad \tilde{\phi}'(\delta) = \phi_2 \delta. \quad (22)$$

В свою очередь, асимптотическое поведение функций  $\tilde{v}, \tilde{h}, \phi$  при больших x есть

$$\widetilde{v}(x) \approx \widetilde{v}_{\infty} \frac{e^{-x\sqrt{\widetilde{M}^2 - \widetilde{\mu}_2^2}}}{\sqrt{x}},$$

$$\widetilde{h}(x) \approx \widetilde{h}_{\infty} \frac{e^{-x\sqrt{\widetilde{M}^2 - \widetilde{\mu}_1^2}}}{\sqrt{x}},$$

$$\widetilde{\phi}(x) \approx \widetilde{M} - \widetilde{\phi}_{\infty} \frac{e^{-x\sqrt{2\widetilde{A}\widetilde{M}^2}}}{\sqrt{x}}.$$
(23)

Соответствующие результаты численных расчетов приведены на рис. 1-4.





Рисунок 3 – Профили цветовых электрических и магнитных полей  $\tilde{E}_{\rho}^2 = g E_{\rho}^2 / \phi^2(0), \tilde{E}_z^7 = g E_z^7 / \phi^2(0), \tilde{H}_{\varphi}^5 = g H_{\varphi}^5 / \phi(0)$  при постоянных  $\tilde{\Lambda} = 0.1, \tilde{\lambda} = 2, \tilde{v}_0 = 0.6, \tilde{\phi}_0 = 1.$ 



Рисунок 4 – Профили цветовых электрических и магнитных полей  $\tilde{E}_{\rho}^2 = g E_{\rho}^2 / \phi^2(0), \tilde{E}_z^7 = g E_z^7 / \phi^2(0), \tilde{H}_{\phi}^5 = g H_{\phi}^5 / \phi(0)$  при постоянных  $\tilde{\Lambda} = 0.1, \tilde{\lambda} = 2, \tilde{h}_0 = 0.2, \tilde{\phi}_0 = 1.$ 



Рисунок 5 – Безразмерная линейная плотность энергии  $g^2 \tilde{\varepsilon} = g^2 \varepsilon / \phi^4(0)$ при постоянних  $\tilde{\lambda} = 2$ ,  $\tilde{\Lambda} = 0.1$ ,  $\tilde{\phi}_0 = 1$ ,  $\tilde{h}_0 = 0.2$  (справа) и при постоянных  $\tilde{v}_0 = 0.6$  (слева)



**Рисунок 6** – Энергетический спектр при постоянных  $h_0$  (слева) и при постоянных  $\tilde{v}_0$  (справа) а также контурный профиль энергии.

Выражение для полной энергии системы:

$$\mathcal{E} = 2\pi \int_0^\infty \rho \varepsilon(\rho) d\rho. \tag{24}$$

Безразмерная полная энергия определяется как  $g^2 \tilde{\mathcal{E}} = g^2 \mathcal{E} / \phi^2(0)$ , и она конечна при всех значениях  $\tilde{v}_0, \tilde{h}_0, \phi_0$  Профили распределений полной энергии по радиусу трубки при различных значениях параметров системы приведены на рис. 5-6.

### Выводы

В этой работе мы исследовали цилиндрически-симметричные решения (глюонные трубки с потоком цветового электрического поля вдоль трубки) в SU(3) неабелевой теории Прока, взаимодействующей со скалярным полем Хиггса. Показано, что такие решения существует только при некоторых фиксированных значениях параметров  $\tilde{\mu}_{1,2}$  и  $\tilde{M}$ . Полученные решения являются регулярными в том смысле, что все физические поля падают экспоненциально на больших расстояниях от центра трубки, и это позволяет иметь конечную линейную плотность энергии для такой трубки.

Получены следующие результаты:

1. Найдены трубчатые решения в SU(3) теории Прока + скалярное поле Хиггса, имеющие продольное электрическое поле.

2. Исследованы свойства этих решений при различных значениях параметров  $\tilde{v}_0$  и  $\tilde{h}_0$ .

3. Построен энергетический спектр линейной плотности энергии таких конфигураций.

Отметим в заключение, что наличие исследованных нами решений в неабелевой теории Прока с потоком цветового электрического поля позволяет предположить, что теории Прока могут использоваться в качестве приближенного описания некоторых физических объектов в КХД (например, потоковых трубок между кварками, которые удерживают их в связанном состоянии).

#### Литература

1 Scipioni R. Isomorphism between non-Riemannian gravity and Einstein-Proca-Weyl theories extended to a class of scalar gravity theories // Class. Quant. Grav. – 199. – Vol.16. – P.2471-2478.

2 Tomaschitz R. Quantum tachyons // Eur. Phys. J. D. - 2005. - Vol.32. - P.241-255.

3 Sigal R. and Shamaly A. Tachyon behavior in general relativity // Phys. Rev. D. - 1974. - Vol.10. - P.2358-2361.

4 Ponglertsakul S. and Winstanley E. Solitons and hairy black holes in Einstein–non-Abelian–Proca theory in anti-de Sitter spacetime // Phys. Rev. D. – 2016. – Vol.94, no.4. – ArtNo 044048.

5 Brito R., Cardoso V., Herdeiro C.A.R. et al. Proca stars: Gravitating Bose–Einstein condensates of massive spin 1 particles // Physics Letters B. – 2016. – Vol.752. – P.291-295.

6 Herdeiro C.A.R., Pombo A.M. and Radu E. Asymptotically flat scalar, Dirac and Proca stars: Discrete vs. continuous families of solutions // Physics Letters B. – 2017. – Vol.773. – P.654-662.

7 Herdeiro C.A.R., Radu E. and Runarsson, Kerr black holes with Proca hair // Class. Quant. - 2016. - Vol. 33, no.15. ArtNo154001.

8 Zihao M., Witek H. and Cardoso V. Nonlinear interactions between black holes and Proca fields // Class. Quant. Gravity. – 2015. – Vol.32. – ArtNo.234003.

9 Edery A., and Marachevsky V. Compact dimensions and the Casimir Effect: The Proca Connection //Journal of High Energy Physics. – 2008. – Vol.12. – P.35-56.

10 Barton G. and Dombey N. The Casimir Effect With Finite Mass Photons //Annals Phys. - 1985. - Vol.162. - P.231-304.

11 Teo L.P. Casimir effect of massive vector fields //Phys. Rev. D. – 2010. – Vol.82. – P.105002-105020.

12 Heisenberg L. Generalization of the Proca Action //Journal of Cosmology and Astroparticle Physics. – 2014. – Vol.05. – P.015.

13 Allys E., Peter P. and Rodriguez Y. Generalized Proca action for an Abelian vector field //Journal of Cosmology and Astroparticle Physics. –2016. Vol.02. –P.004.

14 Silenko A.J. Relativistic quantum mechanics of a Proca particle in Riemannian spacetimes //Phys. Rev. D. – 2018. – Vol. 98, no.2. ArtNo 025014.

15 de Felice A., Heisenberg L. and Tsujikawa S. Observational constraints on generalized Proca theories //Phys. Rev. D. – 2017. – Vol.95, no.12. – ArtNo 123540.

16 Creutz M. Monte Carlo study of quantized SU(2) gauge theory //Phys. Rev. D. - 1980. - Vol. 21. - P.2308-2315.

17 Wilson K.G. Confinement of Quarks //Phys.Rev. D. - 1974. - Vol.10. - P.2445-2459.

18 Adare A. and et al. Single electron yields from semileptonic charm and bottom hadron decays in Au+Au collisions at  $\sqrt{sNN=200 \text{ GeV}}$  //Phys. Rev. C. – 2016. – Vol.93, no. 3. – ArtNo 034904.

19 Ashman J. and et al. A Measurement of the Spin Asymmetry and Determination of the Structure Function g(1) in Deep Inelastic Muon-Proton Scattering //Phys. Lett. B. – 1988. – Vol.206. – P.364.

20 Nayak G.C. Gauge invariant Noether's theorem and the proton spin crisis //Journal of High Energy Physics. -2018. - Vol.03. - P.101-126.

21 Dorokhov E., Kochelev N.I. and Zubov Y.A. Proton spin within nonperturbative QCD //Int. J. Mod. Phys. A. – 1993. – Vol. 8. – P.603-651.

22 Yang N. and Mills R.L. Conservation of Isotopic Spin and Isotopic Gauge Invariance //Phys. Rev. - 1954. - Vol.96. - P.191-195.

23 Dzhunushaliev V., Folomeev V., and Makhmudov A. Non-Abelian Proca-Dirac-Higgs theory: Particlelike solutions and their energy spectrum //Phys. Rev. D. – 2019. – Vol.99, no. 7. – ArtNo076009.

24 De Felice A., Heisenberg L., Kase R., Mukohyama S., Tsujikawa S. and Zhang Y.I. Effective gravitational couplings for cosmological perturbations in generalized Proca theories //Phys. Rev. D. – 2016. – Vol. 94, no.4. – ArtNo 044024.

25 Dzhunushaliev V. and Folomeev V. Proca tubes with the flux of the longitudinal chromoelectric field and the energy flux/momentum density //The European Physical Journal C. – 2020. – Vol.80. – ArtNo1043.

#### References

1 R. Scipioni, Class. Quant. Grav. 16, 2471-2478 (1999).

2 R. Tomaschitz, Eur. Phys. J. D 32, 241-255 (2005).

3 R. Sigal and A. Shamaly, Phys. Rev. D 10, 2358-2361 (1974).

4 S. Ponglertsakul and Winstanley, Phys. Rev. D 94, no.4, 044048 (2016).

5 Brito, R., Cardoso, V., Herdeiro, C. A. R., et al., Phys. Letters B 752, 291-295 (2016).

6 C.A.R. Herdeiro, A. M. Pombo and E. Radu, Phys. Letters B 773, 654-662 (2017).

7 C.A.R. Herdeiro, E. Radu and Runarsson, Class. Quant. 33, no.15, 154001 (2016). https://doi.org/10.1088/0264-9381/33/15/154001.

8 M. Zihao, H. Witek and V. Cardoso, Class. Quant. 32, 234003 (2015).

- 9 Edery, Ariel and Marachevsky, Valery, Journal of High Energy Physics 12, 35-56, (2008).
- 10 G. Barton and Norman Dombey, Annals Phys 162, 231-304, (1985).
- 11 L.P. Teo, Phys. Rev. D 82, 105002-105020, (2010).
- 12 L. Heisenberg, Journal of Cosmology and Astroparticle Physics 05, 015 (2014)...
- 13 E. Allys, P. Peter and Y. Rodriguez, J. of Cosm. and Astropart. Phys. 02, 004 (2016).

- 14 A.J. Silenko, Phys. Rev. D 98, no.2, 025014 (2018).
- 15 A. de Felice, L. Heisenberg and S. Tsujikawa, Phys. Rev. D 95, no.12, 123540 (2017).
- 16 M.Creutz, Phys. Rev. D 21, 2308-2315, (1980), doi: 10.1103/PhysRevD.21.2308.
- 17 K.G. Wilson, Phys.Rev. D 10 2445-2459 (1974).
- 18 A. Adare and et al, Phys. Rev. C 93, no. 3, 034904 (2016).
- 19 J. Ashman and et al, Phys. Lett. B 206, 364 (1988).
- 20 G.C. Nayak, Journal of High Energy Physics 03, 101-126, (2018).
- 21 E. Dorokhov, N. I. Kochelev and Y. A. Zubov, Int. J. Mod. Phys. A 8, 603 (1993).
- 22 N. Yang and R.L. Mills, Phys. Rev. 96, 191-195 (1954).
- V. Dzhunushaliev, V. Folomeev, and A. Makhmudov, Phys. Rev. D 99(7), 076009 (2019).
  De Felice, L. Heisenberg, R. Kase, S. Mukohyama, S. Tsujikawa and Y. I. Zhang, Phys. Rev. D 94(4), 044024, (2016).
- 25 V. Dzhunushaliev and V. Folomeev, The European Physical Journal C 80, 1043 (2020).

# 2-бөлім ПЛАЗМА ФИЗИКАСЫ

# Section 2 PLASMA PHYSICS

Раздел 2 ФИЗИКА ПЛАЗМЫ IRSTI 29.17.00

## https://doi.org/10.26577/RCPh.2020.v75.i4.02

# K. Cistakov<sup>1\*</sup>, P. Christ<sup>1</sup>, L. Manganelli<sup>1</sup>, R. Gavrilin<sup>1,2</sup>, A. Khurchiev<sup>1,2</sup>, S. Savin<sup>1,2</sup>, M. Iberler<sup>1</sup>, J. Jacoby<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Institute for Applied Physics, Germany, Frankfurt am Main <sup>2</sup>Institute for Theoretical and Experimental Physics, Russia, Moscow \*e-mail: Cistakov@iap.uni-franfurt.de

# STUDY ON A DENSE THETA PINCH PLASMA FOR ION BEAM STRIPPING APPLICATION FOR FAIR

The transfer of ions to a higher charge state is of central importance for the development of new accelerator facilities. That is why the comparative analysis of the current stripping alternatives is a relevant topic. Currently, mainly gas and foil strippers are used for increasing the particle charge state. Even when their efficiency or lifetime has proved to be less than optimal, as these alternatives either require great effort or are not suitable. Compared to the gas and foil stripper the alternative of using a plasma stripper has a much higher effectiveness and a higher lifetime [1-13] That is why the plasma stripper has been proposed for the FAIR project (Facility for Antiproton and Ion Research) in Darmstadt, Germany.

To further develop this subject, the plasma physics group of the Institute of Applied Physics at the University of Frankfurt is researching on an alternative for the Z-pinch plasma cell. During our research, various prototypes and solutions have been investigated [4-6], [8], [11], [14-16]. As a result, the optimal ignition criterion for the inductively coupled plasma ignition was determined, the optimal geometry of the discharge vessel, the required particle density and temperature of the plasma were calculated. Different coil configurations have been developed, built and tested. With some of them (spherical theta pinch and spherical screw pinch), beam time experiments were performed.

This contribution presents the current state of plasma strippers with fully ionized hydrogen with simultaneously high particle densities in the range of some  $10^{16}$  cm<sup>-3</sup> for FAIR. Charge distributions after the ion beam plasma and ion beam cold gas interactions were measured and compared. As expected, the effective state of charge after interaction with plasma was higher than after interaction with gas (q<sub>p</sub> = 32.84 versus q<sub>gas</sub> = 29.41).

Kew words: pinch plasma, FAIR, plasma physics, ion beam stripping.

К. Чистяков<sup>1\*</sup>, Ф. Христ<sup>1</sup>, Л. Манганелли<sup>1</sup>, Р. Гаврилин<sup>1,2</sup>, А. Хурчиев<sup>1,2</sup>, С. Савин<sup>1,2</sup>, М. Иберлер<sup>1</sup>, И. Якоби<sup>1</sup>

<sup>2</sup>Қолданбалы физика институты, Германия, Франкфурт-на-Майне қ. <sup>1</sup>Теориялық және эксперименттік физика институты, Ресей, Мәскеу қ. \*e-mail: Cistakov@iap.uni-franfurt.de

# FAIR жобасы үшін тета пинч плазмасы негізінде иондық стрипперді зерттеу

Үдеткіш қондырғылардың жаңа түрін жасауда иондарды сыдыру әдісімен жоғары зарядты күйге ауыстыру соңғы кездері басты назар аудартып отыр және осы себепті салыстырмалы анализді қажет ететін өзекті тақырыптардың біріне айналды. Қазіргі уақытта бөлшектердің зарядын жоғарылату үшін сыдыру ортасы ретінде негізінен газ және фольга қолданылады. Алайда олардың тиімділігі және жұмыс жасау мерзімі төмен. Бұлармен салыстырғанда, баламалы сыдыру ортасы ретінде плазманы пайдалану газға қарағанда әлдеқайда жоғары тиімділікке ие және фольгаға қарағанда ұзақ мерзімде жұмыс жасайды [1-13]. Сондықтан Германияның Дармштадт қаласындағы FAIR (Facility for Antiproton and Ion Research) жобасына плазмалық стриппер ұсынылды.

Осы тақырыпты одан әрі дамыту үшін Франкфурт университетінің қолданбалы физика институтының плазма физикасы тобы Z-пинчті плазманы баламалы сыдыру ортасы ретінде зерттеп келеді. Осы зерттеулердің негізінде әртүрлі прототиптер мен шешімдер алынды [4-6], [8], [11], [14-16]. Сонымен қатар осы зерттеулердің нәтижесінде индуктивті байланысқан плазманы генерациялау үшін оңтайлы параметрлер анықталды, разряд түтігінің оңтайлы геометриясы, бөлшектердің концентрациясы және плазма температурасы есептелді, әр түрлі катушкалар конфигурациясы жасалды және экспериментте сыналды. Сондай-ақ олардың кейбіреулерімен (сфералық тета пинч және сфералық бұрандалы пинч) өмір сүру уақытттары бойынша салыстырулар жүргізілді.

Бұл зерттеулер FAIR үшін шамамен 10<sup>16</sup> см<sup>-3</sup> диапазонында бөлшектердің концентрациясы жоғары толық иондалған сутегі плазмалық стрипперлерінің қазіргі жағдайын көрсетеді. Иондар ағыны мен плазманың өзара әсерлесуінен кейінгі және иондар ағыны мен салқын газ арасындағы өзара әрекеттесуден кейінгі зарядтың таралуы өлшеніп, алынған нәтижелер бірбірімен салыстырылды. Күткендей, плазмамен әсерлескеннен кейінгі зарядтың тиімді күйі газбен әсерлескеннен гөрі жоғары болатындығы анықталды (qp = 32,84 versus qgas = 29,41).

Түйін сөздер: пинч плазмасы, FAIR, плазма физикасы, иондық стриппер.

К. Чистяков<sup>1\*</sup>, Ф. Христ<sup>1</sup>, Л. Манганелли<sup>1</sup>, Р. Гаврилин<sup>1,2</sup>, А. Хурчиев<sup>1,2</sup>, С. Савин<sup>1,2</sup>, М. Иберлер<sup>1</sup>, И. Якоби<sup>1</sup> <sup>1</sup>Институт прикладной физики, Германия, г. Франкфурт-на-Майне <sup>2</sup>Институт теоретической и экспериментальной физики, Россия, г. Москва \*e-mail: Cistakov@iap.uni-franfurt.de

### Исследование плотности плазмы тета-пинча для применения в качестве ионного стриппера для проекта FAIR

Перевод ионов в более высокое зарядовое состояние имеет центральное значение для разработки новых ускорительных установок. Поэтому сравнительный анализ существующих альтернатив зачистки является актуальной темой. В настоящее время для увеличения зарядового состояния частиц используются в основном газовые и фольговые стрипперы. К сожалению, из-за своей низкой эффективности, как газовой мишенью или недолговечны как углеродные пленки. В отличие от этих методов, плазменная альтернатива имеет гораздо более высокую эффективность по сравнению с газовым стриппером и более длительный срок службы по сравнению со стриппером фольги [1-13]. Плазменная мишень была предложен для проекта FAIR (Установка для исследования антипротонов и ионов) в Дармштадте, Германия.

Для дальнейшего развития этой темы группа физики плазмы Института прикладной физики Франкфуртского университета исследует альтернативу плазменной ячейке с Z-пинчем. В процессе этой работы были исследованы различные прототипы и решения [4-6], [8], [11], [14-16]. В результате был определен оптимальный критерий зажигания для индуктивной плазмы, рассчитаны оптимальная геометрия разрядного сосуда, требуемая плотность частиц и температура плазмы. Были разработаны, изготовлены и испытаны различные конфигурации катушек. С некоторыми из них (сферический тета-пинч и сферический винтовой пинч) были проведены эксперименты на ионном ускорителе в Дармштадте.

Эта статья представляет текущее состояние плазменных стрипперов с полностью ионизованным водородом с одновременно высокими плотностями частиц в диапазоне примерно в несколько 10<sup>16</sup> см<sup>-3</sup> для FAIR. Распределения заряда после взаимодействия ионного пучка с плазмой были измерены и сравнены с распределением после взаимодействия ионного пучка с холодным газом. Как и ожидалось, эффективное состояние заряда после взаимодействия с плазмой было выше, чем после взаимодействия с газом (qp = 32,84 против qgas = 29,41)

Ключевые слова: плазмы тета-пинча, FAIR, физика плазмы, ионный стриппер.

### Introduction

The higher effectiveness of the plasma stripper has already been demonstrated in several experiments with Z-Pinch plasma [10].

As effective as a plasma stripper might be, this method needs improvement, since the lifetime of the system is limited, due to the electrode erosion. A solution to this disadvantage is an electrodeless inductive ignition of the plasma. Additionally, with an inductive ignition the magnetic field extends predominantly in the center of the coil parallel to the beam, having no influence on the beam optics.

The interaction between the ion beam and the stripping medium is determined by several simul-

taneous processes and the final state of the ions is a result of their dynamic equilibrium. Beam ions loose electrons due to the coulomb collisions and at the same time capture electrons by various recombination processes. While the ionization cross sections for plasma and cold gas targets are practically identical, the recombination cross sections are determined by several state dependent processes. Recombination is the sum of the capture of bound electrons, radiative recombination and dielectric recombination.

In cold gas, the capture of bound electrons is the recombination with the largest cross section. An example of iodine projectiles with 1.5 MeV/u in hydrogen gas may be up to 10<sup>-8</sup> cm<sup>3</sup>/s (Figure 1). However, this type of recombination is not relevant to the fully ionized plasma target because of the absence of such electrons (Figure 2).

The equilibrium charge states for gold ions (Figure 3) have been calculated by V. Shevelko in the framework of expertise requested by the work group.

The plasma stripper experiment is one of the most important research activities of our research group. A major feature of the pinch plasma is the use of a large cylindrical discharge vessel surrounded by a spiral induction coil, which is connected to a capacitor bank via a coaxial transmission line. The components form a resonant circuit at a frequency of 8.65 kHz.

The measurements were done with a stored energy of around 15kJ, which can be increased up to 50kJ. The alternating current reaches peak values of 71.5 kA and current rise times (20%-80%) of 4.65 kA/ $\mu$ s. The stored energy is switched by a thyratron switch. One of the principal advantages of this concept is the high energy transfer efficiency of up to 40% and the potential of high pulse repetition rates. Fig. 4 shows the experimental set up of the plasma stripper device. In addition, a differential pump system is symmetrically connected for attaching the experiment to the beam line.

A dipole magnet was used as charge state separator to perform the charge state distribution diagnostics. In this context, a scintillator was utilized as the detector.

Energy loss diagnostics were made with Time of Flight (TOF) method. For this reason, a diamond detector was used, because it possesses a high response time (less than 0.1 ns) and high sensitivity. The diamond detector was installed at 6324 mm from the centre of theta pinch coil. Pulsed microbunches of the heavy ion beam registered by the diamond detector with time intervals of 27.67 ns have a certain phase (shift) to the reference signal from the accelerator RF. In the case of a vacuum target, this displacement is a fixed value that is used as a reference for determining the energy loss.

Due to the stopping power of the cold gas target or the plasma target, the fast heavy ion beam suffers energy loss and its velocity decreases, which causes a longer flight time along the TOF flight path. Therefore, the registered microbunch of ion beam show an increased phase shift which is proportional to the energy loss.

Results from beam times with spherical theta pinch and screw pinch were previously presented at IPAC [8]. The results presented here are newly obtained from the beam time at GSI end of March 2019.



**Figure 1** – Rates for 1.5 MeV/u iodine in cold hydrogen gas with  $n_e 10^{17}$  cm<sup>-3</sup>. Here the equilibrium charge is about 21 (arrow), thus considerably less than in the plasma case [12]







**Figure 3** – Simulated charge state distribution for gold ions with initial charge state of 26+.Experimental setup and results





Figure 4 – Experimental set-up of the Theta Pinch Plasma Stripper.

For synchronisation of the plasma of the theta pinch to the ion beam the investigation of the ignition behaviour is of importance. The ignition and light emission of the Plasma was measured with a fast photodiode. The following Figure 5 shows the current and ignition behaviour of the cylindrical Theta Pinch. The capacity of the experimental set up was 60 µF. The measurement was performed at a voltage of 20 kV at a pressure of 30 Pa (H2). The photodiode signal shows that the ignition of the plasma starts during the second negative half wave of the oscillating current and the brightest luminescence effect is within the second positive half wave. In the beam time was decided to increase the voltage to 22kV. In this way, pressure could be raised to 40 Pa accordingly. Plasma ignition time has remained the same.

During the gas discharge, the transmission of the ion beam through the stripper cell was very low, which was very likely due to parasitic magnetic field components outside the coil. Consequently, the ion beam must be delayed for several hundred microseconds. In this case the magnetic field was not so strong, but the plasma density and temperature have already decreased significantly.

The electron density, as well as the electron temperature, are an important factor for the efficiency of ion stripping. Consequently, time-resolved measurements of the electron density were performed (Figure 7). The electrical parameter like capacity ( $60\mu$ F), voltage (22kV) and the pressure (40Pa) were identically to those of the beam time. The electron density ( $n_{e}$ ) was calculated from a semi-empiric formula Fleurier by measuring the Stark-broadening ( $\Delta\lambda_{s}$ ) of the H beta line [17].

$$n_s = 1.03 \cdot 10^{16} (\Delta \lambda_s [nm])^{1.488} \, cm^{-3}.$$

It is based on Griem's formula [18], but unlike it, it does not depend on density and temperature coefficients.

Like the luminescence behaviour, the maximum of the electron density of around  $4.5 \times 10^{16}$  cm<sup>-3</sup> was measured at the third and fourth current half. At the time of the charge distribution measurement, the electron density decreased significantly and oscillated in the range from  $0.2 \times 10^{16}$  cm<sup>-3</sup> to  $1 \times 10^{16}$  cm<sup>-3</sup>. The time resolution of density measurements is 0.4 $\mu$ s. The error of the electron density measurements is approximated to 10%. The electron temperature was measured time-resolved with a resolution of  $2\pm 1 \mu$ s. Fig. 6 shows the electron temperature during measurement of charge distribution. The error of the electron temperature measurements is between 4% and 25% depending on the absolute value. During the beam time the charge state distribution was measured for cold gas and plasma. The initial ion beam charge state was Au+26 with an energy of 3.6MeV/u. Fig. 8 shows the charge state distribution after crossing the stripping cell with cold gas and plasma. The charge state distribution with plasma is shifted to a higher ionisation degree of the Au-beam. As expected, the effective state of charge after interaction with plasma was  $q_p = 32.84$  versus after interaction with gas  $q_{gas} = 29.41$ .

Another important result is an energy loss of heavy ions in plasma. An attempt was made to get a time-resolved evaluation of complete macrobunch. Unfortunately, due to technical problems, the macro bunch was not continuous, but had gaps in the micro bunch structure making a time-resolved evaluation quite difficult.

The Fig. 9 shows that along with the expected deceleration in the plasma, there is an unexpected short-time acceleration of ions after each change in the direction of the current. Maximum measured phase shift of 2.45 ns when decelerating and 2.48 ns when accelerating ions corresponds to an energy loss or gain of 14.45 and 14.63 MeV respectively. The reasons for an acceleration of ions are still being investigated.

The Fig 10 show the phase shift of the ion beam temporal behaviour starting from 800µs after experiment trigger. The beam transmission has become significantly better. Before each ion stopping phase through the plasma there is a short acceleration phase, which was likely caused by space charges in the plasma.



Figure 5 – Current and ignition behaviour of the Theta Pinch plasma



Figure 6 – Time-resolved electron temperature.



Figure 7 – Time-resolved electron density.



Figure 8 – Charge distribution of ion beam after passing cold gas and plasma



Figure 9 – Blue is time of flight difference ( $\Delta t$ ) between the ion beam signal after plasma and the reference signal after cold gas. Red is discharge current signal from Rogowski coil and green is photo diod signal.



Figure 10 – Blue is time of flight difference ( $\Delta t$ ) between the ion beam signal on the diamond detector after plasma and the reference signal after cold gas during measurement of charge distribution. Red is discharge current signal from Rogowski coil.

# Conclusion

The beam transfer through the experiment needs to be improved. For this reason, a new enlarged diaphragm system is currently being worked on. It is also planned for the next beam time that the ion beam will not be focused on the center of the experiment but will go parallel to the Z axis of the magnetic field. The Penning source is not very suitable for TOF measurements because it has its own «sputter» frequency of approx. 100 kHz. This property, together with the low particle current, made data analysis even more difficult.

Unfortunately, measurements were taken very late after the trigger experiment. However, experiment has shown the advantages of a plasma over cold gas even at low electron density and temperature. The short acceleration phase immediately after each plasma ignition needs to be investigated extensively. The working hypothesis is the creation of a large space charge in the plasma compression phase. Since the pinch phase of interest to us begins much later, this acceleration does not lead to a disadvantage for plasma strippers.

In general, the experiment was designed for much larger voltages, which could not be completely exhausted due to strong magnetic fields. After the problem with the influence of the magnetic field on beam penetration is solved, discharge energy can be increased up to 50 kJ. With the higher discharge energies, the energy input into plasma also increases. This leads to much higher densities and temperatures of plasma, which in turn results in better stripping properties of the device. To separate the pressure from the stripper to the vacuum of the accelerator a plasma window was designed and is now under investigation [19].

## Acknowledgment

Many Thanks Sero Zächter, Kristina Zerbe, Christofer Wagner, Alex Müller-Münster, Thilo Ackermann and the whole plasmaphysics group and the Goethe-University Frankfurt for supporting. Also, many thanks to BMBF (Bundesministerium für Bildung und Forschung) and HIC for FAIR (Helmholtz International Center for FAIR) for the financial support.

#### References

1 Barth W. et al. High current uranium beam measurements at GSI-UNILAC for FAIR //Proceedings, IPAC'18, 2018. – 4 p.

2 Barth W. et al. Carbon stripper foils for high current heavy ion operation //J Radioanal Nucl Chem. -2013. - Vol. August - P.1047-1053.

3 Cayzac W. et al. Ion energy loss at maximum stopping power in a laser-generated plasma. – Darmstadt: Technische Universität Darmstadt, 2013. – 331 p.

4 Christ P. et al, Study on a dense and high ionized plasma for ion beam stripping /GSI-FAIR scientific report. – 2017. – P.256.

5 Loisch G., Xu G., Cistakov K., Fedjuschenko A., Iberler M., Liu Y., Rienecker T., Schönlein A., Senzel F., Wiechula J. et Jacoby J. Review of the State-of-the-Art Development of the Spherical Theta Pinch Plasma Source //IEEE Transactions on Plasma Science. – 2014. – Vol. 42. – P.1163.

6 Xu G. et al. Beam transmission for a plasma stripper device //High Energy Density generated by Heavy IOn and Laser Beams. -2014. -P.17.

7 Hoffmann D. Beam-plasma interaction experiments with heavy ion beams //Journal de Physique Colloques. – 1988. – Vol. 49, No. C7. – P C7-159-C7-168.

8 Iberler M. et al. Development and Investigation of Pulsed Pinch Plasmas for The Application as FAIR Plasma Stripper /Part of Procs 7th Intern. Particle Accelerator Conference (IPAC 2016). – 2016. – 3 p.

9 Jacoby J. et al. Interaction of heavy ions with plasma //Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. – 1996. – Vol.115. – P.7-13.

10 Jacoby J. et al. Stopping of Heavy Ions in a Hydrogen Plasma //Physical Review Letters. - 1995. - Vol.74. - P.1550

11 Loisch G., Xu G., Blazevic A., Cihodariu-Ionita B. et Jacoby J. Hydrogen Plasma Dynamics in the Spherical Theta Pinch Plasma Target for Heavy Ion Stripping //Physics of Plasmas. – 2015. – Vol.22. – Art.No 053502.

12 Peter T. and Meyer-ter-Vehn J. Energy loss of heavy ions in dense plasma. II. Nonequilibrium charge state and stopping powers //Phys. Rev. – 1990. – Vol. 43. – P.2015.

13 Shevelko V.P., Winkler N., Yu I. et Tolstikhina I.Y. Gas-pressure dependence of charge-state fractions and mean charges of 1.4 MeV/u-uranium ions stripped in molecular hydrogen //Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. -2016. - Vol.377. - P.77.

14 Teske C., Jacoby J., Senzel F. and Schweizer W. Energy transfer efficiency of a spherical theta pinch //Pysics of Plasmas. – 2010. – Vol. 17. – Art.No. 043501.

15 Teske C., Liu Y., Blaes S. and Jacoby J. Electron density and plasma dynamics of a spherical theta pinch //Physics of Plasmas. – 2012. – Vol.19. – Art.No.033505.

16 Teske C.J. and Jacoby J. Pulsed Low Frequency Inductively Coupled Plasma Generator and Applications //IEEE transactions on plasma science. – 2008. – Vol.36, No.4. – P.1930.

17 Fleurier C., Sanba A., Hong D., Mathias J. and Pellcier J.C. Plasma Diagnostics in The Heavy Ion Beam-Dense Plasma Interaction Experiment at Orsay //Journal De Physique Colloques. – 1988. – Vol.49, No.C7. – P.141-149.

18 Griem, H.R. Plasma Spectroscopy. - McGraw-Hill, New York; Univ. Microfilms International, 1964.

19 Bohlender B., Michel A., Jacoby J., Iberler M. and Kester O. Characterization of a plasma window as a membrane free transition between vacuum and high pressure //Physical Review Accelerators and Beams. – 2020. – Vol.23 – Art.No 13501.

#### References

1 W. Barth, High current uranium beam measurements at GSI-UNILAC for FAIR, Proceedings, IPAC'18, 4, (2018).

2 W. Barth, J Radioanal Nucl Chem, 29 August, 1047-1053 (2013).

3 W. Cayzac, Ion energy loss at maximum stopping power in a laser-generated plasma, (Darmstadt: Technische Universität Darmstadt, 2013).

4 P. Christ et al, Study on a dense and high ionized plasma for ion beam stripping, (GSI-FAIR scientific report, 2017), 256 p.

5 G. Loisch, G. Xu, K. Cistakov, A. Fedjuschenko, M. Iberler, Y. Liu, T. Rienecker, A. Schönlein, F. Senzel, J. Wiechula et J. Jacoby, IEEE Transactions on Plasma Science, 42, 1163 (2014).

6 G. Xu et al., High Energy Density generated by Heavy Ion and Laser Beams, 17, (2014).

7 D. Hoffmann, Journal de Physique Colloques, 49, C7-159-C7-168 (1988).

8 M. Iberle et al., Development and Investigation of Pulsed Pinch Plasmas for The Application as FAIR Plasma Stripper, Part of Procs 7th Intern. Particle Accelerator Conference (IPAC 2016), 3 (2016).

9 J. Jacoby, Nuclear Instruments and Methods in Phys. Research B, 115, 7-13 (1996).

10 J. Jacoby, Physical Review Letters, 74, 1550 (1995).

11 G. Loisch, G. Xu, A. Blazevic, B. Cihodariu-Ionita et J. Jacoby, Physics of Plasmas 22, 053502 (2015).

12 T. Peter and J. Meyer-ter-Vehn, Physical Review, 43 (4), 2015 (1990).

13 V.P. Shevelko, N. Winkler, I. Yu et I.Y. Tolstikhina, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, 377, 77

(2016).

14 C. Teske, J. Jacoby, F. Senzel and W. Schweizer, Phys. of Plasmas, 17, 043501 (2010).

15 C. Teske, Y. Liu, S. Blaes, and J. Jacoby, Physics of Plasmas, 19, 033505 (2012).

16 C. Teske and J. Jacoby, IEEE transactions on plasma science, 36 (4), 1930 (2008).

17 C. Fleurier, A. Sanba, D. Hong, J. Mathias and J. C. Pellcier, Journal De Physique Colloques, 49, C7, 141-149 (1988).

18 H. R. Griem, Plasma spectroscopy, McGraw-Hill, 1964.

19 B. Bohlender, A. Michel, J. Jacoby, M. Iberler and O. Kester, Physical Review Accelerators and Beams, 23, 13501 (2020).

https://bph.kaznu.kz

FTAMP 29.27.51; 29.27.51

## https://doi.org/10.26577/RCPh.2020.v75.i4.03



Ашық түрдегі ұлттық нанотехнологиялық зертхана, Қазақстан, Алматы қ. \*e-mail: s.mauletbek@gmail.com

# МЫС НАНОБӨЛШЕКТЕРІНІҢ ЖОҒАРЫ ЖИІЛІКТІ СЫЙЫМДЫЛЫҚТЫ РАЗРЯД ПЛАЗМАСЫНЫҢ ЖАРЫҚ ИНТЕНСИВТІЛІГІНЕ ӘСЕРІ

Жұмыста жоғары жиілікті сыйымдылықты разряд плазмасының жарық беру интенсивтілігіне оның құрамындағы нанобөлшектердің әсер етуі туралы нәтижелер келтірілген. Нанобөлшектер плазмалық ортаға түскен мыс атомдарымен молекулаларының және нанокластерлердің өзара бірігуінен пайда болды, яғни плазма агрегациялық орта ретінде жұмыс істейді. Мыс атомдарымен молекулаларының плазмалық ортаға бағытталған ағынын алу, магнетрондық тозаңдандыру жүйесі арқылы жүзеге асты. Плазманың жарық беру қасиетіне тек оның құрамындағы нанобөлшектердің өлшемдерімен концентрациясы әсер етеді. Сондықтан, магнетронның катоды, мыстың орнына кез-келген материал қолдануға болады. Жоғары жиілікті плазмамен магнетрондық разряд ортақ вакуумдық ортада орналасқан және жұмыс газы ретінде тазалық деңгейі жоғары аргон қолданылды. Плазманың жарық интенсивтілігі оның толқын ұзындықтары 737 және 750 нмге сай келетін эмиссиялық спектрлік сызықтары арқылы бақыланды. Осылайша, плазмадағы нанобөлшектердің концентрациясы магнетрондық тозаңдандыру процесінің жүру уақытына тәуелді болатыны және оның уақыт өте қанығатындығы анықталды. Эксперимент нәтижелері көрсеткендей плазманың жарық интенсивтілігі магнетрондық тозаңдандыру процесі 7, 14, 20 және 40 секунд жүрген кезде, сәйкесінше салыстырмалы бірлікте 4451, 5280, 10725 және 13545 ретімен жоғарылайтындығы анықталды. Яғни, қарастырылып отырған уақыт аралығында плазманың жарық интенсивтілігі алғашқы мәнінен 3 есе өсті. Тозаңдандыру процесі 1 минуттан артық болса плазма интенсивтілігі әрі қарай елерліктей жоғарыламайды, яғни қанығып отыр. Бұл плазма көлемінің нанобөлшектермен мейілінше толатындығын көрсетеді. Эксперимент нәтижелері, тұтынатын энергия қуатын өзгерттпей, газдық разрядты электр шамдарының жарық интенсивтілігін арттыру үшін қолданысқа ие болуы әбден мүмкін.

**Түйін сөздер:** жоғары жиілікті сыйымдылықты разряд плазмасы, магнетрондық тозаңдандыру жүйесі, мыс нанобөлшектері.

# M. Slamia\*, M.K. Dosbolayev

National nanotechnology laboratory of open type, Kazakhstan, Almaty \*e-mail: s.mauletbek@gmail.com

# Effect of copper nanoparticles on plasma glow intensity of high frequency capacitive discharge

The paper presents the results of an experimental investigation of the effect of copper nanoparticles on plasma glow intensity of high-frequency capacitive discharge. Nanoparticles are composed of atoms, molecules and nanoclusters of copper, which are agglomerated, involving into the plasma volume. Magnetron sputtering system was used to obtain flux of copper atoms and molecules into the plasma volume. It is known that only the size and density of nanoparticles affects the optical properties of a plasma. In this case, almost any magnetron cathode material can be used as a source of nanoparticles. High-frequency plasma and magnetron discharge are ignited in the same medium with highly pure argon gas. To analyze the plasma glow intensity, the emission spectral lines with wavelengths of 737 and 750 nm were used. Thereby, it was revealed, that the density of nanoparticles in the plasma medium depends on the duration of the magnetron sputtering process and saturates with time. As the experimental results show, the plasma glow intensity with the duration of the magnetron sputtering process for 7, 14, 20 and 40 seconds, accordingly, increases in relative units by 4451, 5280, 10725, 13545. That is, in this case, the plasma glow intensity with nanoparticles is three times higher than in case where nanoparticles are absent. If the sputtering process continues more than one minute, then the plasma glow intensity of does not significantly increase, this evidence the beginning of saturation of nanoparticles density in the plasma volume due to the escape of nanoparticles from the plasma volume. We believe that the experimental results find application in areas related with problems of increasing the gas-discharge glow intensity for light sources without increasing their input power.

Key words: High-frequency capacitive discharge plasma, magnetron sputtering system, copper nanoparticles.

#### М. Сламия\*, М.Қ. Досболаев

Национальная нанотехнологическая лаборатория открытого типа, Казахстан, г. Алматы \*e-mail: s.mauletbek@gmail.com

### Влияние наночастиц меди на интенсивности свечениz плазмы высокочастотного емкостного разряда

В работе приведены результаты экспериментального исследования, влияние наночастиц меди на интенсивности свечения плазмы высокочастотного емкостного разряда. Наночастицы состоят из атомов, молекул и нанокластеров меди, которые агломерировались, попадая в объем плазмы. Для получения потоки атомов и молекул меди, направленные на плазму, использовалась магнетронная распылительная система. Известно, что на оптические свойства плазмы влияет только размеры и концентрация наночасти в ее объеме. В таком случае, в качестве источника наночастиц, то есть катода магнетрона можно использовать практический любой материал. Высокочастотная плазма и разряд магнетрона зажигается в одной среде с особо чистым газом аргон. Для анализа интенсивности свечения плазмы были использованы ее эмиссионные спектральные линии с длиной волны 737 и 750 нм. Таким образом, были определены, что, концентрация наночастиц в плазменной среде зависит от длительности процесса магнетронного распыления, и с истечением времени насыщается. Как показывает результаты экспериментов, интенсивность свечения плазмы при длительности процесса магнетронного распыления на 7, 14, 20 и 40 секунд, соответственно растет в относительных величинах на 4451, 5280, 10725 и 13545. То есть, в данном случае интенсивность свечения плазмы с наночастицами три раза больше, чем без наночастиц. Если процесс распыления длится более одной минуты, тогда, интенсивность свечения плазмы заметно не растет, это свидетельствует о наступлении насыщения концентрации наночастиц в объеме плазмы, что связано с уходом наночастиц от объема плазмы. Считаем что, результаты экспериментов находят применение в таких областях, где рассматривается проблемы связанные с увеличением интенсивности свечение газоразрядных источников света, не повышая их входную мощность.

Ключевые слова: плазма высокочастотного емкостного разряда, магнетронная распылительная система, наночастицы меди.

# Кіріспе

Иондалған газды плазма деп атаймыз. Демек оның құрамында электрондар, иондар және бейтарап атомдар болады. Газды иондау процесі әртүрлі жолмен жүзеге асады, мысалы лабораторияда көп жағдайда күшті электр өрісі әсерінен. Мұндай плазма – газдық разряд плазмасы деп аталады. Алайда, плазма таза күйде сирек кездеседі, оны алу үшін арнайы шарттар орындалуы қажет. Сонымен, плазманың ластануы оның құрамында тозаңды бөлшектердің болуымен байланысты. Мұндай плазма – тозаңды плазма немесе плазмалық кристал деп аталады [1-9]. Плазма құрамындағы тозаң бөлшектері әдетте плазма бар ыдыс ішінің жеткілікті таза болмауынан, немесе ыдыс қабырғасының плазмамен эсерлескен кезде эрозияланыуынан пайда болады. Сол сияқты электродты разрядтар үшін катодтық тозаңдану әсерінен [10-11] және көміртек құрамды газдарды қолданған кезде

плазма химиялық процестер әсерінен [12-17] де тозаңды бөлшектер құрылып плазма құрамына енеді. Ал лабораториялық жағдайдағы зерттеулерде тозаңды бөлшектер плазмаға әдейі енгізіледі. Тозаңды бөлшектердің өлшемдері эдетте бірнеше нм-ден ондаған мкм-ге дейін жетеді. Осылайша плазма көлеміне енген тозаңды бөлшектер нақты шарттар сақталған кезде ол жерде ұзақ ұсталып тұрады және плазма қасиеттеріне елерліктей әсер етеді. Мысалы оның жарық беру қасиетін өзгертеді [18-21]. Міне осы процесс эксперименттік тұрғыда егжей-тегжейлі зерттеліп, қарастырылып отырған жұмыста нәтижелері көрсетілген.

#### Тәжірибиелік қондырғы

Нанобөлшектердің плазмаға әсерін зерттеу үшін жоғары жиілікті сыйымдылықты разяд (ЖЖСР) және магнетрондық тозаңдандыру әдісі қолданылды. Тәжірибиелік қондырғының принциптік схемасы 1-суретте көрсетілген. Магнетрондық тозаңдану кезіндегі атомдармен молекулалар ағыны ЖЖСР плазмасына еніп, өзара бірігіп, сол жерде нанобөлшектермен нанокластерлер түзеді [22]. ЖЖСР плазмасы өзара параллель орналасқан жазық электродтар аралығында жағылады (7). Электродтар тот баспайтын болаттан дайындалған, диаметрлері 10 см, арақашықтығы 3 см. Төменгі электрод, жилігі 13,56 МГц генераторға (5) жалғанған. Эксперименттер жасау кезіндегі негізгі параметрлер: жоғарғы жилікті қорек көзінің қуаты 15 Вт, магнетронның газдық разрядының ток күші 0,1-0,6А және газ қысымы 0,1-1,2 торр аралығында болды. Жұмыс газы ретінде аргон қолданылды. Газдық разрядтың эмиссиялық спектрлері Solar S100 аспабымен түсірілді және арнайы компьютерлік бағдарламалар көмегімен өңделді.



 сурет – Эксперименттік қондырғының прициптік схемасы:
 1 – магнетрон, 2 – тозаңданатын мыс катод, 3 – суыту жүйесі,
 4 – магнетрондық разрядтың қорек көзі, 5 – жоғары жиілікті
 сыйымдылықты разрядтың қорек көзі, 6 – магнетронның газдық разряды (MP), 7 – жоғары жиілікті разряд (ЖЖР) плазмасы,
 8 – газ балоны (аргон), 9 – спектрометр, 10 – әмбебап компьютер,
 11 – вакуумдау және газды енгізу бөлігі.

# Нәтижелер және талдаулар

Эксперимент нәтижелері эмиссиялык спектрлік сызықтарды талдауға негізделген. Осы себепті алғашқы зерттеулерде ЖЖСР-пен МР бірге іске қосылып спектрлері түсірілді. МР спектрі 2а суретінде келтірілген. Осы жерден көріп отырғанымыздай жұмыс газы аргондікімен қоса қысқа толқын бөлігіне қарай мыс сызықтары да пайда болған. Демек МР-та мыс атомдарымен молекулаларының бар екенін және олардың козатындығын байқаймыз. Ал осы кезде ЖЖСР плазмасының спектрін алатын болсақ, 2ә суреті, ол жерде тек аргонның сызықтары ғана шыққан. Бұл, мыс атомдарының ЖЖСР плазмасына ене бере өзара бірігіп нанокластерлермен тозаңды нанобөлшекке айналып кететінін көрсетеді. Ал нанобөлшектерді қоздыру үшін ЖЖСР плазмасының энергиясы жеткіліксіз. Сондықтан мыс спектрінің сызықтары байқалмады.

Енді ЖЖСР плазмасынның жарық интенсивтілігіне оның көлеміне енген нанобөлшектердің әсерін қарастырайық. Ол үшін аргонның 750 нм-ге сай келетін спектрлік сызығының интенсивтілігін бақылаймыз. ЖЖСР плазмасына мыс нанобөлшектері енген уақыттан бастап аргонның спектрлік сызығының уақыт бойынша өзгерісі 3-суретте көрсетілген.

Бірінші, таза ЖЖСР плазмасының толқын ұзындығы 750 нм-ге сай келетін спектрлік сызығы түсірілді, оның интенситілігі салыстырмалы бірлікте 4500-ге тең, 2 суреттегі (1) қисық. Кейін магнетрондық тозаңдандыру іске қосылып 5 секунд уақыттан кейін алдыңғы қарастырған спектр қайта бақыланды және салыстырмалы бірлікте оның интенсивтілігі 8500-ға тең болғанын көреміз, яғни 1,89 есеге өсіп тұр, 3 суреттегі (2) қисық. Жоғарыда айтылғандай, ЖЖСР плазмасының жарық интенсивтілігінің өсуіне оның құрамындағы нанобөлшектердің әсері бар екенін байқаймыз. Магнетрондық тозаңдандыру іске қосылып 5 секундтан кейін өшірілді және осы уақыт сәтінен кейін 240 секундтағы бақылау, спектрлік сызықтың жарық интенсивтілігінің сәл төмендегенін көрсетеді, 3 суреттегі (3) қисық. Бұл плазмалық ортадағы нанобөлшектер концентрациясының азайып, және өзара бірігуі нәтижесінде өлшемдерінің өсуімен байланысты болу керек [23-30]. Осы процесті салыстырмалы түрде ұзақ уақыт зерттеу келесі нәтижелерді берді, 4 суретті қараңыз.



2 сурет – Аргон газында жанған разряд спектрлері (p=0,3 торр; P=15 Вт; I=0,1А).



3 сурет – ЖЖСР плазмасының спектрлері: (1) ЖЖСР плазманың нанобөлшектер жоқ кездегі спектір, (2) бөлшектер енгізілгеннен кейінгі (магнетрон қосылғаннан кейінгі) 5-ші секундтағы спектрі, (3) бөлшектер енгізілгеннен кейінгі (магнетрон қосылғаннан кейінгі) 240-шы секундтағы спектрі, (p=0,3 торр; P=15 Bт; I=0,1A).

Бұл жерде де бірінші кезекте таза ЖЖСР плазмасының толқын ұзындығы 750 нм-ге сай келетін спектрлік сызығы түсірілді, оның интенситілігі салыстырмалы бірлікте 1500-ге тең болды, 4 суреттегі (1) қисық. 20 секундтан кейін 5500-ге (4 суреттегі (2) қисық), ал 15 минуттан кейін 6500-ге тең болды (4 суреттегі (3) қисық). Осылайша алғашқы аз уақыт ішінде спектрлік сызық интенсивтілігі тез өсті, 3,67 есе. Ал одан кейінгі 15 минутта өсу қарқыны уақытпен салыстырғанда баяу, небәрі 0,66 есе. Демек нанобөлшектердің концентрациясының өсуі бойынша қанығу орын алды, яғни ЖЖСР плазмасына кірген және ол жерден шыққан бөлшектер саны теңескен болу керек. Енді, (3) қисық алынған уақыт сәтінен бастап МР өшіріп, 15 минуттан кейін спектрлік сызыққа бақылау жүргізетін болсақ, оның жарық интенсивтілігінің шамамен 1,6 есе төмендегенін байқаймыз. Бірақ, (1) қисық алынғандағы алғашқы уақыт сәтімен салыстырғанда спектрлік сызықтың жарық интенсивтілігінің 2,67 еседей жоғары. Магнетрондық тозаңдандыру процесі тоқтағанда үздіксіз келіп отыратын нанобөлшектер ағыны тоқтайды, ал плазмадағы нанобөлшектердің біраз бөлігі плазма көлемінен вакуумдық ортаға шығып кетеді, бірақ толықтай емес. Өйткені спектрлік сызықтың жарық интенсивтілігі алғашқы қалпына оралмайды.

Нанобөлшектер көзі болатын магнетрондық тозандандыру процесін қандайда бір уақыт аралығында жүргізіп қажет болатын нанобөлшектер концентрациясына, ізінше қажет болатын плазманың жарықырау интенсивтілігіне қол жеткізуге болады. Оған 5 суреттегі графиктер дәлел. Яғни, тозаңдандыру процесі 7 және 14 секунд (5а) суреті) сол сияқты 20 және 40 секунд (5ә) суреті) жүрді. Және осыған сай плазманың жарық интенсивтілігі алынады.



4 сурет – ЖЖСР плазмасының спектрлері: (1) ЖЖСР плазманың нанобөлшектер жоқ кездегі спектрі, (2) бөлшектер енгізілгеннен кейінгі (магнетрон қосылғаннан кейінгі) 20-шы секундтағы спектрі, (3) 15 минуттан кейін. Ал (4) бөлшектер көзі болатын магнетрондық тозаңдандыру өшірілгеннен кейін 15-ші минуттағы спектрі, (р=0,43 торр; Р=15 Вт; І=0,3А).



**5 сурет** – ЖЖСР плазмасының толқын ұзындығы 737 нм-ге сай келетін спектрлік сызығының жарық интенсивтілігінің магнетрондық тозаңдандыру процесінің жүру уақытынан тәуелділігі.

Сонымен қатар ЖЖСР плазмасындағы нанобөлшектердің концентрациясы магнетрондық разрядтың ток күшіне де тәуелді болады. Бұл дегеніміз тозаңдану процесінің бірдей уақытында әртүрлі ток күшін орната отырып ЖЖСР плазмасындағы нанобөлшектердің концентрациясын, ізініше плазма жарықтылығының интенсивтілігін басқара аламыз. Бұл нәтижелер графикалық түрде 6 суретте көрсетілген.



6 сурет – ЖЖСР плазмасының толқын ұзындығы 737 нм-ге сай келетін спектрлік сызығының жарық интенсивтілігінің магнетрон разрядының ток күшінен тәуелділігі. (p=0,18 торр; P=15 Вт).

#### Алғыс

Ғылыми зерттеу жұмысы ҚР БҒМ қолдауындағы IRN AP05134391 гранты аясында жүзеге асырылды.

## Қорытынды

Жоғары жиілікті сыйымдылықты разряд плазмасының жарық интенсивтілігіне оның құрамындағы нанобөлшектердің әсері зерттелді, және ол, нанобөлшектердің өлшемдерімен концентрациясына тәуелді болатыны анықталды. Оның себебі, электрон-атомдық қоздыру процестері бөлшектер маңайында жиі жүзеге асатындығынан болуы мүмкін. Эксперимент нәтижелері көрсеткендей плазманың жарық интенсивтілігі алғашқы, нанобөлшектер жоқ кездегімен салыстырғанда көп дегенде 3 есе өсетіндігін көрсетті. Тозаңдандыру процесі 1 минуттан артық болса плазма интенсивтілігі әрі қарай елерліктей жоғарыламайды, яғни плазма көлеміндегі нанобөлшектер концентрациясы қанығу мәніне жетеді. Эксперимент нәтижелері, өзгерттпей, тұтынатын энергия қуатын газдық разрядты электр шамдарының жарық интенсивтілігін арттыру үшін қолданысқа ие болуы әбден мүмкін.

#### Әдебиеттер

1 Chu J.H. and Lin I. Coulomb lattice in a weakly ionized colloidal plasma //Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. - 1994. - Vol. 205. - Iss.1. - P.183-1907.

2 Thomas H., Morfill G., Demmel V., Goree J., Feuerbacher B., and Mohlmann D. Plasma Crystal: Coulomb Crystallization in a Dusty Plasma //Phys. Rev. Lett. - 1994. - Vol. 73. - No 5. - P. 652-655.

3 Hayashi Y. and Tachibana K. Observation of Coulomb-crystal formation from carbon particles grown in a methane plasma //Japan. J. Appl. Phys. – 1994. – Vol. 33. – Part 1. – P. 804-806.

4 Fortov V.E., Nefedov A.P., Petrov O.F., Samarian A.A., and Chernyschev A.V. Particle Ordered Structures in a Strongly Coupled Classical Thermal Plasma //Phys. Rev. E. – 1996. – Vol. 54. – Number 3. –P. R2236-R2238.

5 Ramazanov T.S., Dzhumagulova K.N., Jumabekov A.N., Dosbolayev M.K. Structural properties of dusty plasma in direct current and radio frequency gas discharges //Physics of Plasmas. – 2008. – Vol. 15. – P. 053704.

6 Tsytovich V.N. Perspectives of experimental and theoretical studies of self-organized dust structures in complex plasmas under microgravity conditions //Physics – Uspekhi. – 2015. – Vol. 58(2). – P. 150-166.

7 Robert L. Merlino and John A. Goree. Dusty Plasmas in the Laboratory, Industry, and Space //Phys. Today. – 2004. – Vol. 57(7). – P. 32.

8 Kil-Byoung Chai. Dynamics of nonspherical, fractallike water-ice particles in a plasma environment //Scientific Reports. – 2018. – Vol. 8. – P. 15405.

9 Polyakov D.N., Shumova V.V., and Vasilyak L.M. Positive Column of Glow Discharge with Dust Particles //Surface Engineering and Applied Electrochemistry. - 2013. - Vol. 49. - No. 2. - P. 114-124.

10 Langmuir I., Found C.G. and Dittmer A.F. A new type of electric discharge: the streamer discharge //Science New York. – 1924. – Vol. 60. – P. 392-394.

11 Досболаев М.К., Әбдірахманов А.Р. Влияние катодного распыления на свойств плазмы газового разряда постоянного тока //ПЭОС. – 2019. – Вып. 21. – Т. 2. – С. 61-67.

12 Bouchoule A. and L. Boufendi. Particulate formation and dusty plasma behaviour in argon-silane RF discharge //Plasma sources Sci. Technol. – 1993. – Vol. 2. – P. 204-213.

13 Fabio Palumbo, Chiara Lo Porto, Francesco Fracassi, and Pietro Favia. Recent Advancements in the Use of Aerosol-Assisted Atmospheric Pressure Plasma Deposition //Coatings. – 2020. – Vol 10(440). – P. 1-25.

14 Stancampiano A., Gallingani T., Gherardi M., Machala Z., Maguire P., Colombo V., Pouvesle J.M., Robert E. Plasma and aerosols: Challenges, opportunities and perspectives //Appl. Sci. – 2019. – Vol. 9. – P. 3861.

15 Bhattarai C., Samburova V., Sengupta D., Iaukea-Lum M., Watts A.C., Moosmüller H., Khlystov A.Y. Physical and chemical characterization of aerosol in fresh and aged emissions from open combustion of biomass fuels //Aerosol Sci. Technol. – 2018. Vol. 52. –P. 1266–1282.

16 Weltmann K.D., Kolb J.F., Holub M., Uhrlandt D., Šimek M., Ostrikov K., Hamaguchi S., Cvelbar U., Černák M., Locke B. et al. The future for plasma science and technology //Plasma Process. Polym. – 2019. – Vol. 16. – P. 1800118.

17 Trizio I., Garzia Trulli M., Lo Porto C., Pignatelli D., Camporeale G., Palumbo F., Sardella E., Gristina R., Favia P. Plasma Processes for Life Sciences. In Reference Module in Chemistry, Molecular Sciences and Chemical Engineering //Elsevier Inc.: Waltham, MA, USA, 2018. – 1–24 p.

18 Austin Woodard, Kamran Shojaei, Carla Berrospe-Rodriguez, Giorgio Nava, and Lorenzo Mangolini. Electron emission from particles strongly affects the electron energy distribution in dusty plasmas //J. Vac. Sci. Technol. –2020. – Vol. A38. – P. 023005.

19 Mikikiana M., Couedelb L., Cavarrocc M., Tessier Y., and Boufendi L. Dusty plasmas: synthesis, structure and dynamics of a dust cloud in a plasma //Eur. Phys. J. Appl. Phys. – 2010. – Vol. 49. – P. 13106.

20 Olivier Levasseur, Reetesh Kumar Gangwar, Jacopo Profili, Nicolas Naudé, Nicolas Gherardi, Luc Stafford. Influence of substrate outgassing on the plasma properties during wood treatment in He dielectric barrier discharges at atmospheric pressure // Plasma Process Polym. – 2016. – Vol. 9999. – P. 201600172.

21 Bilik N., Anthony R., Merritt B.A., Aydil E.S., and Kortshagen U.R. Langmuir probe measurements of electron energy probability functions in dusty plasmas //J. Phys. D: Appl. Phys. - 2015. - Vol. 48. - P. 105204 (9pp).

22 Сламия М., Досболаев М.Қ., Рамазанов Т.С., Шаленов Е.О., Примбаев А.Ш., Бимурзаев Н.Р. Магнетрондық разряд плазмасының параметрлерінен тозаңдатылған нанобөлшектермен наноүлдір қасиеттерінің тәуелділігін зерттеу //Вестник КБТУ. – 2020. – Том 17. – Выпуск 4.

23 Boufendi L., Hermann J., Bouchoule A., Dubreuil B., Stoffels E. et al. Study of initial dust formation in an ArSiH4 discharge by laser induced particle explosive evaporation //J. Appl. Phys. – 1994. – Vol. 76. – N1. – P. 148-153.

24 Garofano V., Bérard R., Boivin S., Joblin C., Makasheva K., and Stafford L. Multi-scale investigation in the frequency domain of Ar/HMDSO dusty plasma with pulsed injection of HMDSO //Plasma Sources Science and Technology. –2019. – Vol. 28. – No 5. – P. 1-37.

25 Peter Firth and Zachary C. Holman. Aerosol Impaction-Driven Assembly System for the Production of Uniform Nanoparticle Thin Films with Independently Tunable Thickness and Porosity //ACS Appl. Nano Mater. –2018. – Vol. 1(8). – P. 4351-4357.

26 Sinha M., Izadi A., Anthony R., and Roccabianca S. A novel approach to finding mechanical properties of nanocrystal layers // Nanoscale. –2019. – Vol. 11. – P. 7520.

27 Stephen Exarhos, Alejandro Alvarez-Barragan, Ece Aytan, Alexander A. Balandin, and Lorenzo Mangolini. Plasmonic Core–Shell Zirconium Nitride–Silicon Oxynitride Nanoparticles //ACS Energy Lett. – 2018. – Vol. 3(10). – P.2349-2356.

28 Alejandro Alvarez Barragan, Niranjan V. Ilawe, Lanlan Zhong, Bryan M. Wong, and Lorenzo Mangolini. A Non-Thermal Plasma Route to Plasmonic TiN Nanoparticles //J. Phys. Chem. C. – 2017. –Vol. 121(4). – P. 2316–2322.

29 Lopez T., Mangolini L. In situ monitoring of hydrogen desorption from silicon nanoparticles dispersed in a nonthermal plasma //J Vac Sci Technol B Nanotechnol Microelectron Mater Process Meas Phenom. – 2016. – Vol. 34(4). –P. 41206.

30 Barragan A.A., Hanukovich S., Bozhilov K., Yamijala S.S.R.K.C., Wong B. M., Christopher P., and Mangolini L. Photochemistry of Plasmonic Titanium Nitride Nanocrystals //J. Phys. Chem. – 2019. – Vol. C123. –P. 21796.

#### References

- 1 J.H. Chu and I. Lin, Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 205 (1), 183-1907 (1994).
- 2 H. Thomas, G. Morfill, V. Demmel, J. Goree, B. Feuerbacher, and D. Mohlmann, Phys. Rev. Lett, 73 (5), 652-655 (1994).
- 3 Y. Hayashi and K. Tachibana, Japan. J. Appl. Phys., 33 (1), 804-806 (1994).

4 V. E. Fortov, A. P. Nefedov, O. F. Petrov, A. A. Samarian, and A. V. Chernyschev, Phys. Rev. E, 54 (3), R2236-R2238 (1996).

- 5 T.S. Ramazanov, K.N. Dzhumagulova, A.N. Jumabekov, M.K. Dosbolayev, Physics of Plasmas, 15, 053704 (2008).
- 6 V.N. Tsytovich, Physics Uspekhi, 58(2), 150-166 (2015).
- 7 L. Robert Merlino, and A. John Goree, Phys. Today, 57(7), 32 (2004).
- 8 C. Kil-Byoung, Scientific Reports, 8, 15405 (2018).

9 D.N. Polyakov, V.V. Shumova, and L.M. Vasilyak, Surface Engineering and Applied Electrochemistry, 49(2), 114-124 (2013).

10 I. Langmuir, C.G. Found and A.F. Dittmer, Science New York, 60, 392-394 (1924).

11 M.K. Dosbolayev, А.Р. Әбдірахманов, PEOS, 21 (2), 61-67 (2019). (in Russ).

12 A. Bouchoule and L. Boufendi, Plasma sources Sci. Technol., 2, 204-213 (1993).

13 Fabio Palumbo, Chiara Lo Porto, Francesco Fracassi, and Pietro Favia, Coatings, 10(440), 1-25 (2020).

14 A. Stancampiano, T. Gallingani, M. Gherardi, Z. Machala, P. Maguire, V. Colombo, J.M. Pouvesle, E. Robert, Appl. Sci, 9, 3861 (2019).

15 C. Bhattarai, V. Samburova, D. Sengupta, M. Iaukea-Lum, A.C. Watts, H. Moosmüller, A.Y. Khlystov, Aerosol Sci. Technol, 52, 1266–1282 (2018).

16 K.D. Weltmann, J.F. Kolb, M. Holub, D. Uhrlandt, M. Šimek, K. Ostrikov, S. Hamaguchi, U. Cvelbar, M. Černák, B. Locke et al., Plasma Process. Polym, 16, 1800118 (2019).

17 I. Trizio, M. Garzia Trulli, C. Lo Porto, D. Pignatelli, G. Camporeale, F. Palumbo, E. Sardella, R. Gristina, P. Favia, Elsevier Inc.: Waltham, MA, USA, (2019), 1–24 p.

18 Austin Woodard, Kamran Shojaei, Carla Berrospe-Rodriguez, Giorgio Nava, and Lorenzo Mangolini, J. Vac. Sci. Technol, A38, 023005 (2020).

19 M. Mikikiana, L. Couedelb, M. Cavarrocc, Y. Tessier, and L. Boufendi, Eur. Phys. J. Appl. Phys, 49, 13106 (2010).

20 Olivier Levasseur, Reetesh Kumar Gangwar, Jacopo Profili, Nicolas Naudé, Nicolas Gherardi, Luc Stafford, Plasma Process Polym, 9999, 201600172 (2016).

21 N. Bilik, R. Anthony, B.A. Merritt, E.S. Aydil, and U.R. Kortshagen, J. Phys. D: Appl. Phys, 48, 105204 (9pp) (2015).

22 M. Slamiya, M.K. Dosbolayev, T.S. Ramazanov, E.O. Shalenov, A.Sh. Primbayev, N.R. Bimurzayev, Herald of the KBTU, 17 (4), (2020). (in Kaz).

23 L. Boufendi, J. Hermann, A. Bouchoule, B. Dubreuil, E. Stoffels et al., J. Appl. Phys., 76 (1), 148-153 (1994).

24 V. Garofano, R. Bérard, S. Boivin, C. Joblin, K. Makasheva, and L. Stafford, Plasma Sources Science and Technology, 28, 1-37 (2019).

25 Peter Firth and Zachary C. Holman, ACS Appl. Nano Mater, 1(8), 4351-4357 (2018).

26 M. Sinha, A. Izadi, R. Anthony, and S. Roccabianca, Nanoscale, 11, 7520 (2019).

27 Stephen Exarhos, Alejandro Alvarez-Barragan, Ece Aytan, Alexander A. Balandin, and Lorenzo Mangolini, ACS Energy Lett, 3(10), 2349-2356 (2018).

28 Barragan Alejandro Alvarez , Niranjan V. Ilawe, Lanlan Zhong, Bryan M. Wong, and Lorenzo Mangolini, J. Phys. Chem. C, 121(4), 2316–2322 (2017).

29 T. Lopez, L. Mangolini, J Vac Sci Technol B Nanotechnol Microelectron Mater Process Meas Phenom, 34(4), 41206 (2016).

30 A.A. Barragan, S. Hanukovich, K. Bozhilov, S.S.R.K.C. Yamijala, B.M. Wong, P. Christopher, and L. Mangolini, J. Phys. Chem, C123, 21796 (2019).

https://bph.kaznu.kz

IRSTI 29.27.00

# https://doi.org/10.26577/RCPh.2020.v75.i4.04



IETP Al-Farabi Kazakh National university, Kazakhstan, Almaty \*e-mail: issanova@physics.kz

# TEMPERATURE ANISOTROPY RELAXATION PROCESSES IN DENSE PLASMA

In this work the relaxation processes of dense plasmas were studied. The relaxation rate of a Maxwellian velocity distribution function that has an initially anisotropic temperature  $(T_{\parallel} \neq T_{\perp})$  is an important physical process inertial confinement fusion plasmas. Relaxation characteristics in dense plasmas were studied on the basis of the effective potentials using the Coulomb logarithm. The effective potential is derived using the long wavelength expansion of the polarization function and quantum potential which takes into account the finite value of the interaction potential at close distance. In presented work temperature anisotropy relaxation processes in dense, non-isothermal plasma are considered. These interaction potential between particles take into account such collective effects as the ionization energy depression (reduction) and exchange-correlation effects. Therefore, this allowed us to examine the sensitivity of the computed relaxation time and the corresponding equilibrium plasma temperature on the quality of the description of the screening effect in dense plasmas.

**Key words:** Coulomb logarithm, dense plasma, effective potentials, inertial confinement fusion, temperature anisotropy relaxation.

Т.С. Рамазанов, С.К. Коданова, М.К. Исанова\*, С.А. Оразбаев, Д.Е. Елубаев

Эксперименттік және теориялық физика ғылыми зерттеу институты, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Қазақстан, Алматы қ., \*e-mail: issanova@physics.kz

### Тығыз плазмадағы температуралық анизотропияның релаксация процестері

Бул жұмыста тығыз плазманың релаксация процестері қарастырылды және зерттелді. Максвеллдің таралу функциясының бастапқы анизотропты температурасы бар жылдамдық бойынша релаксация жылдамдығы (Т∥ ≠ Т⊥), инерциялық термоядролық синтездің плазмасындағы маңызды физикалық процесс болып табылды. Жұмыста біз тығыз плазмадағы релаксация сипаттамалары кулондық логарифмді қолдана отырып, эффективті потенциалдар негізінде зерттедік. Эффективті потенциал поляризация функциясы мен кванттық потенциалдың ұзақ толқындық ыдырауын қолдана отырып шығарылатына белгілі жәнее ол жақын қашықтықтағы өзара әрекеттесу потенциалының соңғы мәнін ескереді. Ұсынылған біздің жұмыста тығыз изотермиялық емес плазмадағы температураның анизотропиясының релаксация процестері қарастырылған және зерттелген. Бөлшектердің өзара әрекеттесу потенциалы иондану энергиясының төмендеуі (төмендеуі) және алмасу-корреляциялық әсерлер сияқты ұжымдық әсерлерді ескереді. Осылайша, бұл бізге есептелген релаксация уақыты мен тепе-теңдік плазмасының тиісті температурасының тығыз плазмадағы экрандау әсерін сипаттау сапасына сезімталдығын зерттеуге мүмкіндік берді. Бұл жұмыста модельдің қысқаша сипаттамасы және тығыз плазмадағы температуралық анизотропияның релаксациялық процестерін есептеу нәтижелері келтірілген. Модельдің дұрыстығын көрсету үшін оның нәтижелері МД модельдеу нәтижелерімен салыстырылды.

**Түйін сөздер:** кулондық логарифм, тығыз плазма, эффективті потенциал, инерциялық термоядролық синтез, температуралық анизотропияның релаксациясы.

# Т.С. Рамазанов, С.К. Коданова, М.К. Исанова\*, С.А. Оразбаев, Д.Е. Елубаев

НИИЭТФ, Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Казахстан, г. Алматы, \*e-mail: issanova@physics.kz

#### Процессы релаксации температурной анизотропии в плотной плазме

В данной работе рассмотрены и изучены релаксационные процессы плотной плазмы. Скорость релаксации максвелловской функции распределения по скоростям, которая имеет изначально анизотропную температуру (T<sub>II</sub> ≠ T<sub>L</sub>), является важным физическим процессом в плазме инерционного термоядерного синтеза. Релаксационные характеристики в плотной плазме мы изучали на основе эффективных потенциалов с использованием кулоновского логарифма. Эффективный потенциал выводится с использованием длинноволнового разложения поляризационной функции и квантового потенциала, которое учитывает конечное значение потенциала взаимодействия на близком расстоянии. В представленной работе рассмотрены процессы релаксации анизотропии температуры в плотной неизотермической плазме. Этот потенциал взаимодействия между частицами учитывает такие коллективные эффекты, как снижение (уменьшение) энергии ионизации и обменно-корреляционные эффекты. Таким образом, это позволило нам изучить чувствительность вычисленного времени релаксации и соответствующей температуры равновесной плазмы на качество описания эффекта экранирования в плотной плазме. В работе приводится краткое описание модели и результаты расчета процессов релаксации анизотропии температуры в плотной плазме. Чтобы показать правильность модели, ее результаты сравниваются с результатами МД моделирования.

**Ключевые слова:** Кулоновский логарифм, плотная плазма, эффективные потенциалы, инерционный термоядерный синтез удержанием, релаксация температурной анизотропии.

## Introduction

Intensive studies of the properties of dense nonideal plasma were triggered by the idea of realization of inertial confinement fusion. It should be noted that it is especially important to study relaxation times of electrons and ions. In particular, during compression of a target by the flow of highenergy electrons the non-isothermal plasma with heated electrons and cold ions is created [1-2]. Non-isothermal plasma also appears during interaction of heavy ion beams with a target [3-4].

The temperature equalizes much faster within subsystems of electrons and ions than between electrons and ions. This is explained by a large mass difference between ions and electrons. Different methods are used to study relaxation processes in plasma, and among them there are the method of molecular dynamics (MD) [5-7] and quantum kinetic theory [8-14].

The relaxation of a temperature anisotropy is a canonical example of energy transport in dense plasmas [15-17]. For instance, plasmas that are preferentially heated, or cooled, in one direction will form a temperature anisotropy. Magnetized plasmas often have different energy confinement times either along or against the magnetic field, and can form a temperature anisotropy as a result [18].

In presented work temperature anisotropy relaxation processes in dense, non-isothermal plasma are considered. The relaxation characteristics are obtained on the basis of effective These interaction potential between potentials. particles take into account such collective effects as the ionization energy depression (reduction) and exchange-correlation effects [19]. Below we present a brief description of the model and the results of calculation of temperature anisotropy relaxation processes. To show the correctness of the model, its results are compared with the results of MD simulations.

### **Physical model**

The relaxation rate of the electron-ion temperature, i.e., the rate of energy exchange, is determined by the difference of the average energy or temperature [17]:

$$\frac{dT_{\perp}}{dt} = -\frac{1}{2}\frac{dT_{||}}{dt} = -\nu (T_{\perp} - T_{||}), \qquad (1)$$

where  $T_{\perp}$  and  $T_{\parallel}$  are the perpendicular and parallel temperatures, which related to the total temperature by  $T = (T_{\perp} + T_{\parallel})/3$  the anisotropy relaxation rate is

$$\frac{v}{\overline{v}} = \chi \frac{3\sqrt{\pi}}{16} \frac{(1+2/3A)^{3/2}}{\sqrt{\alpha}A^{5/2}} \times$$

$$\times \int_{0}^{\infty} d\xi \xi^{2} e^{-\alpha\xi^{2}} \frac{\overline{\sigma}^{(2)}}{\sigma_{0}} \times \\ \times \left[ \frac{2}{3} \xi^{2} \alpha \operatorname{Aerf}\left(\xi \sqrt{\varepsilon A}\right) - \psi\left(\xi^{2} \alpha A\right) \right]$$
(2)

where  $\sigma_0 = \pi e^4 / (2k_B T)^2$ ,  $\xi^2 = u^2 / (4k_B T / m)$ ,  $\alpha \equiv T/T_{\perp} = 1/3(1+A)$ ,  $A \equiv \frac{T_{\perp}}{T_{\parallel}} - 1$  is a measure of the temperature enjoychemic and

of the temperature anisotropy, and  $\psi(x) \equiv erf(\sqrt{x}) - \frac{2}{\sqrt{\pi}}\sqrt{x}e^{-x}$  is the Maxwell integral. 1<sup>th</sup> momentum scattering cross section is

$$\overline{\sigma}^{(l)} = 2\pi \int_0^\infty db \, b \left[ 1 - \cos^l \left( \pi - 2\Theta \right) \right] \qquad (3)$$

and  $\theta = \pi - 2\Theta$  is the scattering angle, where

$$\Theta = b \int_{r_0}^{\infty} dr \, r^{-2} \left[ 1 - b^2 / r^2 - \varphi(r) / \xi^2 \right]^{\frac{1}{2}}.$$
 (4)

The Coulomb logarithm on the basis of the effective interaction potential of the particles is determined by the scattering angle of the pair Coulomb collisions. Introducing the centre of mass in the collision process the Coulomb logarithm reads [20-23]:

$$\lambda_{\alpha\beta} = \frac{1}{b_{\perp}^2} \int_0^{b_{max}} \sin^2\left(\frac{\Theta}{2}\right) b \, db \,, \tag{5}$$

here  $b_{\perp} = Z_{\alpha} Z_{\beta} e^2 / (m_{\alpha\beta} v^2)$ ,  $b_{\min} = \max \{ b_{\perp}, \hat{\lambda}_{\alpha\beta} \}$ describes the minimum impact parameter, where  $\hat{\lambda}_{\alpha\beta} = \hbar / \sqrt{2\pi m_{\alpha\beta} k_B T}$  is the thermal de Broglie wave length.

In formula (4)  $\varphi(r)$  is the interaction potential and  $r_0$  is the distance of the closest approach for a given impact parameter b:

$$1 - \frac{\Phi_{\alpha\beta}(r_0)}{E_c} - \frac{b^2}{r_0^2} = 0.$$
 (6)

It is known that in order to correctly describe static and dynamic properties of plasmas the collective screening effect is to be taken into account. In this work the dense plasma is considered for which quantum effects must be taken into account at short distances. Further, the effective interaction potential which including such collective effects as the ionization energy depression (reduction) and exchange-correlation effects [18]:

$$\Phi_{\alpha\beta}(r) = \frac{Z_{\alpha}Z_{\beta}e^{2}}{r} \frac{1}{\gamma^{2}\sqrt{1-\left(2k_{D}/\lambda_{ee}\gamma^{2}\right)^{2}}} \times \left[\left(\frac{1-\lambda_{ee}^{2}B^{2}}{1-\lambda_{ei}^{2}B^{2}}\right)\exp(-rB) - \left(\frac{1-\lambda_{ee}^{2}A^{2}}{1-\lambda_{ei}^{2}A^{2}}\right)\exp(-rA)\right] + \frac{Ze^{2}\exp(-r/\lambda_{ei})}{r\left(1+C_{ei}\right)},$$
(7)

where  $C_{ei} = (k_D^2 \lambda_{ei}^2 - k_i^2 \lambda_{ee}^2) / (\lambda_{ei}^2 / \lambda_{ee}^2 - 1),$   $\gamma^2 = k_i^2 + 1 / \lambda_{ee}^2, \quad \lambda_{ee}^2 = -b_1 / 4k_F^2 \quad \text{(here}$   $b_1 = \theta^{-1} I_{-3/2}(\eta) / (3I_{-1/2}^2(\eta))), \quad k_{De} = k_y,$  $k_D^2 = k_{De}^2 + k_i^2, \text{ and } k_i^2 = 4\pi n_i e^2 / k_B T_i.$ 

# **Results and discussion**

Figures 1-2 shows the parallel and perpendicular temperature profiles at two values of  $\Gamma$  in initial temperatures of  $\overline{T}_{||} = T_{||}/T = 1.15$  and  $\overline{T}_{\perp} = T_{\perp} / T = 0.923 (A = -0.2)$ . Dashed lines show profiles predicted from the HNC approximation, circles - molecular dynamics simulations by S. Baalrud, J. Daligault [17]. The comparison shows good agreement with the predicted monotonically decreasing profiles at the  $\Gamma$  values. As the coupling strength increases, the rate of the relaxation remains well modeled.



Figure 1 – Parallel and perpendicular temperature profiles in initial temperatures of  $\overline{T}_{||} = T_{||}/T = 1.15$  and  $\overline{T}_{\perp} = T_{\perp}/T = 0.923 (A = -0.2)$  at  $\Gamma = 0.05$ .

Figures 3-4 demonstrates temperature relaxation profiles on the basis of the effective potentials and from MD simulations by S. Baalrud, J. Daligault [17] at  $\Gamma = 0.1$ , 1 conducted with a large initial temperature anisotropy of  $T_{\perp}/T_{\parallel} = 10$  (A = 9). The comparison with MD predictions is similar to what was observed at smaller initial anisotropy. The accuracy is, perhaps,



**Figure 3** – Temporary temperature profiles with a highly anisotropic initial condition  $T_{\perp}/T_{\parallel} = 10$  (A = 9) at  $\Gamma = 0.1$ .

Figures 5-6 illustrates the total temperature as a function of time for the same simulations. These show that, at weak coupling, the total temperature, and thus total kinetic energy, does not fluctuate more than approximately 0.1% throughout the evolution of the system. The higher  $\Gamma$  values show that the temperature fluctuates in time by as much



Figure 2 – Parallel and perpendicular temperature profiles in initial temperatures of  $\overline{T}_{||} = T_{||}/T = 1.15$  and

$$\overline{T}_{\perp} = T_{\perp}/T = 0.923 (A = -0.2)$$
 at  $\Gamma = 0.5$ .

slightly less than that observed from the small anisotropy cases in Figures 1-2 near  $\Gamma \simeq 1$ , but the generally good agreement over this entire range of coupling strength provides strong evidence that the theory is robust even at a very large initial anisotropy. Dynamic screening apparently is not significant even at  $T_{\perp}/T_{\parallel} = 10$ .



**Figure 4** – Temporary temperature profiles with a highly anisotropic initial condition  $T_{\perp}/T_{\parallel} = 10$  (A = 9) at  $\Gamma = 1$ .

as 0.5%. These oscillations are not numerical artifacts, but rather represent oscillations in the exchange between kinetic and potential energy associated with correlations as the system relaxes. None of the theories discussed addresses the potential energy of the system, and thus does not model this effect.



Figure 7 show the results of the relaxation rate on the basis of the effective potentials and obtained from the MD data using the fitting procedure, and theoretical approximations. The initial temperature anisotropy for this dataset was the same A = -0.2 as from the data shown in Figures 1-2.



Figure 7 – The rate of anisotropy temperature relaxation in comparison with different theoretical approximations

As expected, the weakly coupled theories compare well with our results and the MD data at sufficiently small coupling strength ( $\Gamma \leq 0.1$ ). There is apparently no significant advantage to accounting for dynamic screening at these conditions. For  $\Gamma \leq 0.1$ , the relaxation rate predicted by all of the theories is slightly larger than what is observed in the MD simulations (e.g., by approximately 20% at  $\Gamma = 0.05$ ). This is likely associated with the assumption made in the theoretical analysis that the distributions maintain the anisotropic Maxwellian form. It is well known in other transport processes that distortions of the distribution function contribute an order unity correction to the transport rates at weak coupling. This is accounted for in hydrodynamic theories, such as Chapman–Enskog.

This comparison between two common approaches to plasma kinetic theory and MD simulations has suggested a few general conclusions with regard to the temperature anisotropy relaxation, and has also revealed a few remaining gaps in current understanding. The data comparison suggests that dynamic screening, which is modeled in the Lenard–Balescu and Generalized Lenard–Balescu theories, does not significantly influence the relaxation rate. The Boltzmann-based approaches (Landau or Effective Potential Theory) can be accurately applied in most situations of practical interest, rather than Lenard– Balescu based theories which are comparatively difficult to evaluate. Comparison with MD revealed that Effective Potential Theory provides an accurate approach to modeling the anisotropy relaxation rate over a similar range of coupling strength as has been encountered for other processes, such as diffusion.

#### Conclusion

The relaxation processes in dense plasmas were studied on the basis of effective interaction potentials taking into account quantum effects of diffraction at short distances and screening at large distances. The results obtained for the Coulomb logarithm and temperature relaxation times for different plasma parameters are consistent with the results of other authors. Thus, knowledge of the values of the transport coefficients of heavy, charged particles in the plasma will help to more accurately calculate the design of thermonuclear target. The method of effective interaction potentials is important as it gives a deeper insight into physics of dense plasmas and can provide an effective tool for the fast and accurate calculation of various physical properties for future technological applications [24-25].

## Acknowledgements

This research has been funded by the Science Committee of the Ministry of Education and Science of the Republic of Kazakhstan (Grant No. AP08856650) «Study of the structural, transport, and thermodynamic properties of non-ideal multicomponent dense plasma with heavy ions» (2020-2022).

#### References

1 Deutsch C., Tahir N.A., Barriga-Carrasco M., Ceban V., Fromy P., Gilles D., Leger D., Maynard G., Tashev B., Volpe L. Multiple scattering in electron fluid and energy loss in multi-ionic targets //Nucl. Instr. Meth. in Phys. Res. A. – 2014. – Vol. 733. – p. 39–44.

2 Ebeling W., Redmer R., Reinholz H., Roepke G. Thermodynamics and Phase Transitions in Dense Hydrogen - the Role of Bound State Energy Shifts //Contrib. Plasma Phys. - 2008. - Vol. 48. - P. 670-685.

3 Tahir N.A., Stőhlker Th., Shutov A., Lomonosov I.V., Fortov V.E., French M., Nettelmann N., Redmer R., Piriz A.R., Deutsch C., Zhao Y., Xu H., Xio G. and Zhan P. Ultrahigh compression of water using intense heavy ion beams: laboratory planetary physics //New Journal of Physics. - 2010. - Vol. 12. - P. 073022.

4 Fertman A.D., Mutin T.Yu., Golubev A., Basko M. et al. Stopping power measurements for 100-keV/u Cu ions in hydrogen and nitrogen //Nucl. Instr. Meth. in Phys. Res. B. - 2006. - Vol. 247. - P. 119–204.

5 Glosli J.N. et al. Molecular dynamics simulations of temperature equilibration in dense hydrogen //Phys. Rev. E. - 2008. - Vol. 78. - P.025401.

6 Dimonte G., Daligault J. Molecular-dynamics simulations of electron-ion temperature relaxation in a classical Coulomb plasma // Phys. Rev. Lett. - 2008. - Vol. 10. - P.135001.

7 Benedict L.X., et al. Molecular Dynamics Simulations of Electron-Ion Temperature Equilibration in an SF6 Plasma //Phys. Rev. Lett. - 2009. - Vol. 102. -P.205004.

8 Brown L.S., Preston D.L., and Singleton Jr. R.L. Charged particle motion in a highly ionized plasma //Phys. Rep. - 2005. - Vol. 410. - P.237.

9 Dharma-wardana M.W.C. Quantum corrections and bound-state effects in the energy relaxation of hot dense hydrogen / Phys. Rev. Lett. - 2008. - Vol.101. - P. 035002.

10 Spitzer L. Physics of Fully Ionized Gases. – N.Y.: Interscience, 1962. –586 p.

11 Gericke D.O., Murillo M.S., Schlanges M.. Dense plasma temperature equilibration in the binary collision approximation //Phys. Rev. E. - 2002. - Vol. 65. - P.036418.

12 Vorberger, D.O. Gericke. Comparison of electron-ion energy transfer in dense plasmas obtained from numerical simulations and quantum kinetic theory //High Energy Density Physics. - 2014. - Vol.10. - P.1-8.

13 Vorberger J., Gericke D.O. Coupled mode effects on energy transfer in weakly coupled, two-temperature plasmas //Phys. Plasma. - 2009. - Vol. 16. – P. 082702.

14 Kodanova S.K., Ramazanov T.S., Issanova M.K., Moldabekov Zh.A., Nigmetova G. Investigation of Coulomb Logarithm and Relaxation Processes in Dense Plasma on the Basis of Effective Potentials //Contrib. Plasma Phys. – 2015. - Vol. 55. No 2-3. – P. 271 – 276.

15 Ichimaru S., Rosenbluth M. N. Relaxation Processes in Plasmas with Magnetic Field. Temperature Relaxations //Phys. Fluids. – 1970. – Vol. 13. – P. 2778.

16 Baalrud S., Daligault J. Temperature anisotropy relaxation of the one-component plasma //Contrib. Plasma Phys. -2017. - Vol. 57. - p. 238-251.

17 Ramazanov T.S. et al. Classical scattering of an ion influenced by polarization effect of dust particles //Recent Contributions to Physics. - 2018. - Vol. 65. - No. 2. - P. 44-50.

18 Ott T., Bonitz M., Hartmann P., Donkó Z. Spontaneous generation of temperature anisotropy in a strongly coupled magnetized plasma //Phys. Rev. E. - 2017. - Vol. 95. - P. 013209.

19 Kodanova S.K., Issanova M.K., Amirov S.M., Ramazanov T.S., Tikhonov A., Moldabekov Z.A. Relaxation of nonisothermal hot dense plasma parameters //Matter and Radiation at Extremes. - 2018. - Vol. 3 (1). – P.40-49.

20 Ordonez C.A., Molina M.I. Evaluation of the Coulomb logarithm using cutoff and screened Coulomb potentials //Phys. Plasmas. - 1994. - Vol. 1. - P. 2515.

21 Ramazanov T.S., Kodanova S.K. Coulomb logarithm of a nonideal plasma //Phys. Plasmas. - 2001. - Vol. 8. - P. 5049.

22 Temirbek A.M. et al. The effect of quantum nonlocality and electron nonideality on the scattering length of an electron on a helium atom in a dense plasma //Recent Contributions to Physics. – 2020. - Vol.. 74. - No.3. - P.30-36.

23 Ismagambetova T.N., Gabdullin M.T. The Pair correlation functions of a dense hydrogen plasma //Recent Contributions to Physics. -2019. -Vol. 68. -No.1. -P.30-36.

24 Kodanova S.K., Ramazanov T.S., Khikmetov A.K., Issanova M.K. Dynamical properties of inertial confinement fusion plasmas //Contributions to Plasma Physics. - 2018. - Vol. 58 (10). - P.946-951.

25 Kodanova S.K., Issanova M.K., Ramazanov T.S., Khikmetov A.K., Maiorov S.A. Simulation of Positronium Plasma by the Molecular Dynamics Method //Contributions to Plasma Physics. - 2019. - Vol. 56 (6). - P.201800178.

#### References

1 C. Deutsch, et al, Nucl. Instr. Meth. in Phys. Res. A 733, 39-44 (2014).

2 W. Ebeling, , et al, Contrib. Plasma Phys. 48, 670-685 (2008).

3 N.A. Tahir, et al, New Journal of Physics, 12, 073022 (2010).

4 A.D. Fertman, et al, Nucl. Instr. Meth. in Phys. Res. B 247, 119–204 (2006).

5 J.N. Glosli et al, Phys. Rev. E 78, 025401 (2008).

6 G. Dimonte and J.Daligault, Phys. Rev. Lett. 10, 135001 (2008).

7 L.X. Benedict, et al. Molecular Dynamics Simulations of Electron-Ion Temperature Equilibration in an SF6 Plasma // Phys. Rev. Lett. - 2009. - Vol. 102. -P.205004.

8 L.S. Brown, D.L. Preston, and R.L. Singleton Jr., Phys. Rep. 410, 237 (2005).

9 M.W.C. Dharma-wardana, Phys. Rev. Lett. 101, 035002 (2008).

10 L. Spitzer, Physics of Fully Ionized Gases, (N.Y.: Interscience, 1962), 586 p..

11 D.O. Gericke, M.S. Murillo, and M. Schlanges, Phys. Rev. E. 65, 036418 (2002).

12 J. Vorberger, D.O. Gericke, High Energy Density Physics, 10, 1-8 (2014).

13 J. Vorberger, D.O. Gericke, Phys. Plasma, 16, 082702 (2009).

14 S.K. Kodanova, T.S. Ramazanov, M.K. Issanova, Zh.A. Moldabekov, and G. Nigmetova, Contrib. Plasma Phys. 55 (2-3), 271 – 276 (2015).

15 S. Ichimaru and M.N. Rosenbluth, Phys. Fluids, 13, 2778 (1970).

16 S. Baalrud and J. Daligault, Contrib. Plasma Phys. 57, 238-251 (2017).

17 T.S. Ramazanov et al., Rec.Contr.Phys., 65 (2), 44-50 (2018).

18 T. Ott, M. Bonitz, P. Hartmann, and Z. Donkó, Phys. Rev. E 95, 013209 (2018).

19 S.K. Kodanova, M.K. Issanova, S.M. Amirov, T.S. Ramazanov, A. Tikhonov, and Z.A. Moldabekov, Matter and Radiation at Extremes, 3 (1), 40-49 (2018).

20 C.A. Ordonez and M.I. Molina, Phys. Plasmas, 1, 2515 (1994).

21 T.S. Ramazanov and S.K. Kodanova, Phys. Plasmas, 8, 5049 (2001).

22 A.M. Temirbek et al., Rec.Contr.Phys. 74 (3), 30-36 (2020).

23 T.N. Ismagambetova, and M.T. Gabdullin, Rec.Contr.Phys. 68 (1), 30-36 (2019).

24 S.K. Kodanova, T.S. Ramazanov, A.K. Khikmetov, and M.K. Issanova, Contributions to Plasma Physics, 58 (10), 946-951 (2018).

25 S.K. Kodanova, M.K. Issanova, T.S. Ramazanov, A.K. Khikmetov, and S.A. Maiorov, Contributions to Plasma Physics, 56 (6), 201800178 (2019).
# 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 МРНТИ 44.41.35, 29.19.31

### https://doi.org/10.26577/RCPh.2020.v75.i4.05



<sup>1</sup>Satbayev University, Физико-технический институт, Казахстан, г. Алматы <sup>2</sup>Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Казахстан, г. Алматы <sup>3</sup>Университет Суонси, Великобритания, г. Суонси \*e-mail: sultzhantuarov@mail.ru

# ИЗГОТОВЛЕНИЕ И АНАЛИЗ ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТИ ПРИ ДЕГРАДАЦИИ ПЕРОВСКИТНЫХ СОЛНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

Метил-аммониевые свинцово-галоидные перовскиты широко признаны в качестве многообещающих материалов для фотоэлектрических приложений. Популярность этих материалов основана на высокой эффективности готовых фотопреобразователей, сопоставимой с эффективностью промышленных кремниевых солнечных элементов, а также на возможности значительного уменьшения стоимости производства. Перовскитные материалы имеют прямую и узкую ширину запрещённой зоны, в результате чего они обладают высокой эффективностью поглощения света, сопоставимой с кремнием, а для получения солнечных элементов требуется тонкий слой раствора, получаемого из растворов, что значительно снижает производство солнечных батарей из перовскита. Процесс изготовления перовскитных солнечных элементов достаточно прост и не требует высоких температур. Кроме того, простота изготовления лабораторных образцов предоставляет возможность разработки данной технологии с низкими капитальными издержками и позволяет присоединиться к общемировым исследованиям и тенденциям в этом направлении. В статье описываются результаты изготовления и изучения деградации под влиянием внешних факторов, атмосферы перовскитных плёнок и солнечных элементов, полученных при температуре 100 °С методом центрифугирования, который дает возможность быстро и легко нанести однородные пленки толщиной от нескольких нанометров до нескольких микрон.

Ключевые слова: альтернативная энергетика, фотовольтаика, перовскитные солнечные элементы.

S.R. Zhantuarov<sup>1\*</sup>, Zh.B. Omarova<sup>2</sup>, A.B. Zhapar<sup>1</sup>, A.K. Shongalova<sup>1</sup>, N.A. Chuchvaga<sup>1</sup>, K.S. Zholdybaev<sup>1</sup>, K.P. Aimaganbetov<sup>1</sup>, M.J. Carnie<sup>3</sup>, N.S. Tokmoldin<sup>1</sup> <sup>1</sup>Satbayev University, Institute of Physics and Technology, Kazakhstan, Almaty <sup>2</sup>Al–Farabi Kazakh National University, Kazakhstan, Almaty <sup>3</sup>Swansea University, United Kingdom, Swansea \*e-mail: sultzhantuarov@mail.ru **Fabrication and degradation performance analysis** 

of perovskite solar cells

Methyl-ammonium lead-halide perovskites are acknowledged as highly promising materials for photovoltaic applications. The popularity of these materials is due to the high efficiency of ready photovoltaic devices comparable to the efficiency of industrial silicon solar cells as well as the possibility of significant reduction in production cost. Perovskite materials have a straight and narrow bandgap, as a result of which they have a high light absorption efficiency comparable to silicon; and to obtain solar cells requires a thin layer of a solution obtained from solutions, which significantly reduces the production of solar cells from perovskite. The fabrication process for perovskite solar cells is rather simple and does not require high temperatures. Also, the ease of manufacturing of laboratory samples gives an opportunity to develop this technology with low capital expenditures and to join to the global research and trends in this field. The paper describes the results of fabrication and study of degradation under the influence of external factors, the atmosphere of perovskite films and solar cells obtained at a temperature

of 100° C by centrifugation, which makes it possible to apply uniform films with a thickness of several nanometers to several microns easy and quickly.

Key words: alternative energy, photovoltaics, perovskite solar cells.

С.Р. Жантуаров<sup>1</sup>, Ж.Б. Омарова<sup>2</sup>, А.Б. Жапар<sup>1</sup>, А.К. Шонғалова<sup>1</sup>, Н.А. Чучвага<sup>1</sup>, К.С. Жолдыбаев<sup>1</sup>, К.П. Аймағанбетов<sup>1</sup>, М.Дж. Карни<sup>3</sup>, Н.С. Токмолдин<sup>1</sup> <sup>1</sup> Satbayev University, Физика-техникалық институты, Қазақстан, Алматы қ. <sup>2</sup> Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Қазақстан, Алматы қ. <sup>3</sup>Суонси Университеті, Ұлыбритания, Суонси қ. \*e-mail: sultzhantuarov@mail.ru

#### Перовскитті күн элементтерін нашарлауы өнімділігін өндіру және талдау

Метил аммонийінің қорғасын галогенді перовскиттері фотоэлектрлік қосымшалар үшін перспективті материалдар ретінде кеңінен танымал. Бұл материалдардың танымалдылығы дайын фотоконверторлардың жоғары тиімділігіне, өнеркәсіптік кремний күн батареяларының тиімділігімен, сондай ақ өндіріс шығындарын едәуір төмендету мүмкіндігіне негізделген. Перовскитті материалдарда тікелей және тар тыйым салынған аймақ ені болатыны белгілі, нәтижесінде олар кремниймен салыстырғанда жарықты жұтудан жоғары тиімділікке ие, ал күн элементтерін алу үшін ерітінділерден алынатын ерітінді қабаты керек, және ол перовскиттан жасалған күн батареяларын өндірісін айтарлықтай төмендетеді. Перовскитті материалдарды әзірлеу үрдісі өте қарапайым және жоғары температураны қажет етпейді. Сонымен қатар, зертханалық үлгілерді жасаудың қарапайымдылығы аз шығындармен осы технологияны дамытуға мүмкіндік береді және әлемдік зерттеулер мен осы бағыттағы трендтерге қосылуға мүмкіндік береді. Бұл мақалада 100 °С температурада қалыңдығы бірнеше нанометрден бірнеше микрондар аралығында болатын біртекті қабықшаны тез және оңай жалатуға мүмкіндік беретін центрфугалау әдісімен жасалған перовскитті қабықшалар мен күн элементтерін сыртқы факторлардың, атмосферасының әсерінен деградацияны жасау және зерттеу нәтижелері сипатталған.

Түйін сөздер: баламалы энергетика, фотовольтаика, перовскиттік күн элементтері.

#### Введение

С каждым годом альтернативные источники энергии привлекают все больше внимания. Важным аргументом в использовании альтернативной энергии является истощаемость месторождений полезных ископаемых, применяемых для её выработки: уголь, нефть, газ. Кроме этого продукты сжигания мазута и угля на ТЭЦ, выходя в атмосферу, вызывают её загрязнение, что оказывает негативное влияние на экологию. Особое место среди альтернативных и возобновляемых источников энергии занимает энергия Солнца, которая изучается отдельной наукой – фотовольтаикой [1, 2].

Фотоэлектрические солнечные преобразователи основаны на явлении внутреннего фотоэффекта, среди которых традиционными и широко распространёнными на сегодняшний день являются кремниевые солнечные элементы и батареи на их основе, благодаря их долговечности (до 25 лет работы) и довольно высоким КПД от 15% и выше [3]. Однако, пока еще достаточно высокая себестоимость солнечных элементов на основе кремния и других неорганических фотопреобразователей на основе соединений индия, теллура, селена, мышьяка, кадмия, арсенида галлия, сдерживает повсеместное применение данных типов солнечных батарей [4]. Кроме того, токсичность материалов, применяемых при их изготовлении; необходимость создания и использования специальных условий на определённых этапах производственного процесса, например, вакуума, высоких температур для плавления исходного сырья, использование точного и сложного оборудования, при изготовлении солнечных элементов также влияет на их цену. Наличие вышеуказанных проблем порождает необходимость поиска и разработки более дешевых и широко распространённых материалов, а также более простых и менее затратных технологий производства для сокращения расходов в беспощадном использовании солнечной энергетики. Соединения на основе органических материалов демонстрируют высокий потенциал применения в качестве альтернативных материалов, которые позволят решить данные проблемы. Эффективность элементов на основе органических материалов не всегда конкурирует с кремниевыми и неорганическими фотопреобразователями, но невысокая эффективность компенсируется возможностью производить их на большой площади. Кроме того, органические материалы обладают гибкостью, прозрачностью, малым весом, что расширяет область их применения [5–10]. В 2009 году в направлении исследований в области органических материалов для фотоэнергетики выделилась группа материалов на основе свинцово-галоидных перовскитов (CH<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>PbI<sub>2</sub>, CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbCl<sub>3</sub>, CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbBr<sub>3</sub>) [11–13], которые настоящий момент демонстрируют очень высокую эффективность, на уровне 22,1% для лабораторных образцов[14]. На данный момент основными задачами в области исследования перовскитных солнечных элементов является поиск решений по предотвращению деградации солнечных элементов в результате воздействия влаги и света, уменьшению токсичности используемых материалов и увеличению эффективности солнечных элементов[15-22]. Целью данной работы являлось изучить влияние окружающей среды на перовскитную плёнку CH<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>PbI<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> и солнечный элемент на основе свинцово-галлоидного метил-аммониевого перовскита (FTOстекло/PCBM/CH<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>PbI<sub>2</sub>/Spiro-OMeTAD/Au) на примере отслеживания изменения вольт-амперной характеристики и оптической плотности.

### Методика и методы исследований

Перовскитные элементы изготавливали следующим образом: поверхность стекла, с нанесённым прозрачным проводящим слоем из оксида фтора–олова (FTO – fluorine–doped tin oxide), сначала очищали и обезжиривали, и после этого переходили к процессу подготовки растворов PC<sub>60</sub>BM ( $C_{72}H_{14}O_2$ ), Spiro–OMeTAD ( $C_{81}H_{68}N_4O_8$ ), MAPbI (CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub>). После их подготовки переходили к осаждению на спиннере, модель WS–650–8В, производства «Laurell Technologies». Параметры осаждения методом центрифугирования для всех слоёв были одина-ковые: 30 сек., 4000 об/мин.

Тонкие плёнки PC<sub>60</sub>BM (Phenyl–C–61– bytiricacidandmethylester – далее «PCBM»), играющие роль электропроводящих слоев п–типа проводимости, осаждались из раствора хлорбензола с концентрацией 20 мг/мл. Далее для улучшения проводящих свойств был нанесён слой из батокупроина (BCP) из раствора с концентрацией 1мг/мл в этаноле. Следующим шагом являлось нанесение активного светопоглощающего слоя из раствора MAPbI. Он был приготовлен из порошков йодидов метиламмония (MAI) свинца (PbI), растворённых в смеси из диметилфтормамида с объемом 0,8 мл и диметилсульфооксида – 0,2 мл. Для лучшего растворения твёрдых частиц проводили нагревание флакона при 60 °C. При центрифугировании, до его завершения, для ускорения процесса кристаллизации плёнки капали 100 мкл этилацетата. После окончания раскручивания образца, плёнку отожгли при 100 °С. Последним осаждали плёнку из раствора Spiro-OMeTAD, выполняющего функцию проводящего дырки слоя р-типа. Концентрация Spiro-OMeTAD, изначально представленного в виде порошка, растворённого в хлорбензоле, составляла 85 мг/мл. После осаждения плёнки выдерживались в темноте при сухой атмосфере 16 часов. Подготовка Spiro-OMeTAD и других растворов проводилась внутри перчаточного ящика. После центрифугирования были осаждены золотые контакты термовакуумным напылением на установке «Edwards 306».

Основная особенность солнечного элемента с архитектурой FTO/PCBM/BCP/MAPbI/Spiro-ОМеТАD/Аи в том, что составляющие её полупроводниковые слои обладают различными типами проводимости. Плёнка с PCBM – n-тип, и Spiro-OMeTAD - р-тип, перовскитный слой - i-тип, а вся структура относится к типу n-iрструктуры. Основным интересом к солнечным элементам из перечисленных выше материалов был обусловлен тем, что нужно было получить устройство при температурах отжига плёнок до 100 °C, так как данное значение температур позволяет в дальнейших исследованиях попытаться изготовить его на гибких пластиковых подложках. Однако ниже будет изучаться вопрос влияния факторов среды, при которой хранились образцы, на соответствующие им параметры.

После завершения осаждения контактов солнечные элементы с активной площадью 0,087 см<sup>2</sup> были протестированы под имитатором солнечного излучения NewportOriel Sol3A класса AAA при освещении AM 1,5. Измерение оптических характеристик плёнок проводилось на приборе QEX–10, производства компании «PV Measurements, Inc.».

Условия хранения образцов: отсутствие света, хранение в пластиковом контейнере – для солнечных элементов, и в закрытой чашке Петри – для плёнок, комнатная температура, при нормальной влажности в помещении 30–60% [23]. После изготовления перовскитных фотопреобразователей были выбраны 3 наиболее производительных образца под номерами №2, №4, №9.

## Результаты и их обсуждение

На рисунке 1 представлены в виде результатов измерений, графики зависимости плотности токов короткого замыкания от напряжения холостого хода солнечного элемента с наиболее оптимальными кривыми до деградации и после деградации. Каждый из солнечных элементов имеет свой номер, на поверхности которого расположено 4 контакта. Контакты, с которых снимали сигнал, пронумерованы в соответствии с номерами элементов: первая цифра означает номер образца, вторая цифра соответствует номеру контакта (пикселю), с которого получали сигнал. В таблицах 1 и 2 приведены их основные выходные параметры до и после деградации.



Рисунок 1 – Вольтамперные характеристики образцов измеренных до деградации и после деградации

Образец №	Номер контакта на поверхности образца (пиксель)	Voc, V	Jsc, mA/cm <sup>2</sup>	FF,%	Eff., %
9	9_3	1,02	18,83	68,25	13,11
	9_6	1,02	18,74	63,08	12,05
4	4_2	1,02	27,05	55,38	15,27
	4_3	1,02	24,73	57,95	14,40
2	2_3	1,03	20,40	71,63	15,07
	2_6	1,03	18,68	72,36	13,93

Таблица 1 – Параметры образцов вольт-амперных характеристик до деградации

Таблица 2 – Параметры образцов вольт-амперных характеристик после деградации

Образец №	Номер контакта на поверхности образца (пиксель)	Voc, V	Jsc, mA/cm <sup>2</sup>	FF,%	Eff., %
9	9_3	0,92	4,79	59,67	2,63
	9_6	0,85	3,67	44,48	1,39
4	4_2	0,92	2,72	71,36	1,78
	4_3	0,94	5,58	52,76	2,78
2	2_3	0,93	2,53	69,11	1,62
	2_6	0,94	2,39	74,21	1,66

Из приведённых данных видно, что хранение образца в течение 5 дней при нормальных условиях влияет на производительность солнечных элементов: например, образец № 4 в точке 4\_3 в 1-ый день показал эффективность в 14,40% (Voc = 1,02 B, Jsc = 24,73 мА/см2, FF = 57,95%), в 5-ый день эффективность упала до 2,78% (Voc = 0,94 B, Jsc = 5,58 мА/см2, FF = 52,76%). Аналогично падает производительность образцов №9, №2.

В эффективность солнечного элемента вносят вклад напряжение холостого хода V, плотность тока короткого замыкания Ј., и фактор заполнения FF [24]. Заметно, что с течением времени данные параметры начинают уменьшаться, особенно во всех образцах падает  $V_{oc}$  и  $J_{sc}$ . Величина FF, напротив, в некоторых случаях растёт, например, у образцов №4 и №2 в точке 4 2 и 2 6, соответственно, но в основном также уменьшается в остальных точках образцов. Однако важно отметить, что FF обратно пропорционально зависит от значений  $V_{oc}$  и  $J_{sc}$  [8], соответственно основными параметрами эффективности солнечного элемента являются  $V_{oc}$  и  $J_{sc}$ . При этом необходимо отметить, что  $V_{oc}$  зависит от ширины запрещённой зоны поглотителя, а J зависит от диапазона спектра, поглощаемого активным слоем в устройстве [24]. Таким образом, можно заключить, что под действием факторов среды происходят изменения в ширине запрещённой зоны и ухудшается поглощательная способность активных слоёв в образцах

Возможно, также будет интересно изучить деградацию производительности перовскитных солнечных элементов на основе  $CH_3NH_3PbI_xCl_x$ , так как солнечный элемент на его основе будет меньше подвержен деградации. Данное утверждение строится на основании наблюдения за изменением оптической плотности перовскитной плёнки, хранящейся в аналогичных условиях, что и изученные выше солнечные элементы на основе  $CH_3NH_3PbI_3$ . Изучение стабильности плёнки  $CH_3NH_3PbI_xCl_x$  с помощью наблюдения усредненных значений оптических плотностей в диапазоне длин волн от 300 до 1100 нм, полученных из спектров пропускания, продемонстрировано на рисунке 2.

Как видно из полученных значений при трёхнедельном мониторинге среднее значение оптической плотности плёнки варьируется в очень узком интервале от 0,389 до 0,400, то есть изменения параметров незначительные порядка тысячных долей – 0,011. Исследование стабильности солнечных элементов на основе перовскитов CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>x</sub>Cl<sub>x</sub> планируется проводить в будущем, при дальнейших исследованиях.



Рисунок 2 – Мониторинг средних значений оптических плотностей перовскитной плёнки CH<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>Pbl<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> в течение трёх недель, точками отмечены даты измерений

#### Выводы

Высокая эффективность и относительно простая технология изготовления перовскитных солнечных элементов сделали данное направление исследований популярным и перспективным. Результаты, описанные в статье, показывают возможность участвовать и развиваться в данном направлении отечественным учёным, исследователям и разработчикам и приобщиться к общемировым тенденциям в развитии фотовольтаики.

Критическими факторами, оказывающие влияние на свойства образцов являются влажность и воздух при указанных выше условиях хранения. Эти факторы способствуют постепенному поглощению образцами паров воды из окружающей атмосферы, а также их окислению [25,26]. Положительным моментом является, что элемент может работать спустя 5 дней, отрицательным – падение эффективности заметное.

Решением в вопросах, связанных со стабильностью работы перовскитных фотопреобразователей под влиянием внешних факторов, является при потенциальном применении обеспечить герметизацию образца, чтобы оградить от влияния влажности и воздуха, пассивацию плёнок или использовать другие материалы, которые будут более устойчивы к факторам среды. В указанных направлениях и сосредоточено большинство исследований в данной области.

Работа выполнена в рамках проектов грантового и программы целевого финансирования Комитета Науки МОН РК ИРН АР05133651 и BR05236404, а также при поддержке фонда «Global Challenges Research Fund (GCRF)», RIG1029–107.

#### Литература

1 Karatayev M., Clarke M.L. Current energy resources in Kazakhstan and the future potential of renewables: A review //Energy Procedia. - 2014. - Vol. 59. - P. 97-104.

2 Павлов Н. Солнечная энергия – энергия будущего //Электроника. Наука Технология Бизнес. – 2013. – Vol. 1. – Р. 130–137.

3 Green M.A. The path to 25% silicon solar cell efficiency: History of silicon cell evolution //Prog. Photovoltaics Res. Appl. – 2009. – Vol. 17 – No 3. – P. 183–189.

4 Dincer F. The analysis on photovoltaic electricity generation status, potential and policies of the leading countries in solar energy //Renew. Sustain. Energy Rev. - 2010. - Vol. 15. - P. 713-720.

5 Di Giacomo F., Zardetto V., D'Epifanio A., Pescetelli S., Matteocci F., Razza S. Flexible perovskite photovoltaic modules and solar cells based on atomic layer deposited compact layers and UV-irradiated  $TiO_2$  scaffolds on plastic substrates //Adv. Energy Mater. Wiley-VCH Verlag, -2015. - Vol. 5 – No 8. - P. 1401808.

6 Susrutha B., Giribabu L., Singh S.P. Recent advances in flexible perovskite solar cells //Chem. Commun. Royal Society of Chemistry. - 2015. - Vol. 51 - No 79. - P. 14696-14707.

7 Weerasinghe H. C., Dkhissi Y., Scully A. D., Caruso R. A., Cheng Y. B. Encapsulation for improving the lifetime of flexible perovskite solar cells //Nano Energy. Elsevier Ltd. – 2015. – Vol. 18. – P.118–125.

8 Паращук Д. Ю., Кокорин А.И. Современные фотоэлектрические и фотохимические методы преобразования солнечной энергии //Российский химический журнал. – 2008. – Т. 52. – No. 6 – С. 107-117.

9 Sharma K., Sharma V., Sharma S. S. Dye-sensitized solar cells: fundamentals and current status //Nanoscale research letters. - 2018. - Vol. 13. - No. 1. - P. 381.

10 Сигаев А.П. Применение золь-гель-технологии для создания полупроводниковой структуры фотоэлектрического преобразователя энергии //Молодой ученый. – 2014. – Vol. 21. – Р. 231–234.

11 Carnie M.J., Charbonneau C., Davies M. L., O'Regan B., Worsley D. A., Watson T. M. Performance enhancement of solution processed perovskite solar cells incorporating functionalized silica nanoparticles //J. Mater. Chem. A. Royal Society of Chemistry. – 2014. – Vol. 2. – No 40. – P. 17077–17084.

12 Qin P., Tanaka S., Ito S., Tetreault N., Manabe K., Nishino H., Grätzel M Inorganic hole conductor-based lead halide perovskite solar cells with 12.4% conversion efficiency //Nat. Commun. Nature Publishing Group. – 2014. – Vol. 5. – No 1. – P.1–6.

13 Liao W.Q., Zhang Y., Hu C. L., Mao J. G., Ye H. Y., Li P. F., Xiong R. G. A lead-halide perovskite molecular ferroelectric semiconductor //Nat. Commun. Nature Publishing Group. – 2015. – Vol. 6. – No 1. – P.1–7.

14 Yang W. S., Park B. W., Jung E. H., Jeon N. J., Kim Y. C., Lee D. U., Seok S. I. Iodide management in formamidiniumleadhalide-based perovskite layers for efficient solar cells //Science. – 2017. – Vol. 356. – No 6345. – P.1376–1379.

15 Wang D., Wright M., Elumalai N. K., Uddin A. Stability of perovskite solar cells //Solar Energy Materials and Solar Cells. Elsevier. – 2016. – Vol. 147. – P. 55–275.

16 Babayigit A., Ethirajan A., Muller M., Conings B. Toxicity of organometal halide perovskite solar cells //Nature Materials. Nature Publishing Group. – 2016. – Vol. 15 – No 3. – P.247–251.

17 Hao F., Stoumpos C. C., Cao D. H., Chang R. P., Kanatzidis M. G. Lead-free solid-state organic-inorganic halide perovskite solar cells //Nat. Photonics. Nature Publishing Group. - 2014. - Vol. 8. - No 6. - P. 489-494.

18 Berhe T. A., Su W. N., Chen C. H., Pan C. J., Cheng J. H., Chen H. M. Organometal halide perovskite solar cells: Degradation and stability //Energy and Environmental Science. Royal Society of Chemistry. – 2016. – Vol. 9. – No 2. – P.323–356.

19 Boix P. P., Nonomura K., Mathews N., Mhaisalkar S. G. Current progress and future perspectives for organic/inorganic perovskite solar cells //Materials Today. Elsevier B.V. – 2014. – Vol. 17. – No 1. – P. 6–23.

20 Niu G., Guo X., Wang L. Review of recent progress in chemical stability of perovskite solar cells //J. Mater. Chem. A. Royal Society of Chemistry. - 2015. - Vol. 3. - No 17. - P.8970-8980.

21 Dunfield S. P., Bliss L., Zhang F., Luther J. M., Zhu K., van Hest M. F. From Defects to Degradation: A Mechanistic Understanding of Degradation in Perovskite Solar Cell Devices and Modules //Adv. Energy Mater. Wiley–VCH Verlag. – 2020. – Vol. 10. – No 26. – P. 1904054.

22 Divitini G., Cacovich S., Matteocci F., Cinà L., Di Carlo A., Ducati C. In situ observation of heat-induced degradation of perovskite solar cells //Nature Energy. Nature Publishing Group. – 2016. – Vol. 1. – No 1. – P.1–6.

23 ГОСТ 30494–96 Здания жилые и общественные. Параметры микроклимата в помещении. – Госстрой России, 1999. – С. 6-7

24 Reshi H. A., Zargar R. A. Perovskite Solar Cells: The Challenging Issues for Stable Power Conversion Efficiency //Recent Development in Optoelectronic Devices. – 2018. – Vol. 117.

25 Emami S., Andrade L., Mendes A. Recent progress in long-term stability of perovskite solar cells //U.Porto J. Eng. – 2015. – Vol. 1. – No 2. – P. 52–62.

26 Eperon G.E., Habisreutinger S. N., Leijtens T., Bruijnaers B. J., van Franeker J. J., DeQuilettes D. W. The Importance of Moisture in Hybrid Lead Halide Perovskite Thin Film Fabrication //ACS Nano. American Chemical Society. – 2015. – Vol. 9. – No 9. – P. 9380–9393.

#### References

- 1 M. Karatayev and M.L. Clarke, Energy Procedia 59, 97-104 (2014).
- 2 N. Pavlov, Elektronika: nauka, tekhnologiya, biznes 1, 130–137 (2013). (In Russ).
- 3 M.A. Green, Progress in Photovoltaics: Research and Applications 17.3, 183-189 (2009).
- 4 F. Dinçer, Renewable and Sustainable Energy Reviews 15.1 713–720 (2011).
- 5 F. Di Giacomo, Advanced Energy Materials 5, 8 (2015)
- 6 B. Susrutha, L. Giribabu, and S. P. Singh, Chemical communications 51,79 (2015).
- 7 H.C. Weerasinghe, Y. Dkhissi, A.D. Scully, R.A. Caruso, and Y B. Cheng, Nano Energy, 118–125 (2015).
- 8 P.D. Yur'yevich and K.A. Il'ich, Rossiyskiy khimicheskiy zhurnal 52.6 (2008). (In Russ).
- 9 K. Sharma, V. Sharma, S. and S. Sharma, Nanoscale research letters 13, 381-427 (2018).
- 10 A. P. Sigayev, Molodoy uchenyy 21, 231-234 (2014). (In Russ).

11 M.J. Carnie, C. Charbonneau, M.L. Davies, B.O. Regan, D.A. Worsley, and T.M. Watson, Journal of Materials Chemistry A 2.40, 17077–17084 (2014).

12 P. Qin, Nature communications 5.1, 1–6 (2014).

13 W. Q. Liao, Nature communications 6.1, 1-7 (2015).

14 W. S. Yang, Science 356.6345, 1376-1379 (2017).

15 D. Wang, M. Wright, N. K. Elumalai, and A. Uddin, Solar Energy Materials and Solar Cells 147, 255-275 (2016).

- 16 A. Babayigit, A. Ethirajan, M. Muller, and B. Conings, Nature Materials 15.3, 247-251 (2016).
- 17 F. Hao, C.C. Stoumpos, D.H. Cao, R.P.H. Chang, and M.G. Kanatzidis, Nature Photonics 8.6, 489-494 (2014).
- 18 T.A. Berhe, Energy and Environmental Science 9.2, 323–356 (2016).
- 19 P.P. Boix, K. Nonomura, N. Mathews, and S. G. Mhaisalkar, Materials Today 17.1, 16-23 (2014).
- 20 G. Niu, X. Guo, and L. Wang, Journal of Materials Chemistry 3.17, 8970-8980 (2015).
- 21 S.P. Dunfield, Advanced Energy Materials 10.26, 1904054 (2020).
- 22 G. Divitini, S. Cacovich, F. Matteocci, L. Cinà, A. Di Carlo, and C. Ducati, Nature Energy 1.1, 1-6 (2016).

23 GOST 30494–96 Residential and public buildings. Microclimate parameters for indoor enclosures (Gosstroy Rossii, 1999), p.6–7. (In Russ).

24 Z.R.A. Reshi H. A., Recent Development in Optoelectronic Devices 117 (2018).

- 25 S. Emami, L. Andrade, and A. Mendes, U. Porto Journal of Engineering 1.2, 52-62, (2015).
- 26 G.E. Eperon, ACS Nano 9.9, 9380-9393, (2015).

FTAMP 29.19.22

#### https://doi.org/10.26577/RCPh.2020.v75.i4.06



<sup>1</sup>Ақпараттық және есептеуіш технологиялар институты, Қазақстан, Алматы қ. <sup>2</sup>Клод Бернар атындағы Лион университеті, Франция, Лион қ. \*e-mail: gauhar-mussabek@mail.ru

# МЕДИЦИНАЛЫҚ ҚОЛДАНЫСТАРҒА АРНАЛҒАН КЕУЕКТІ ТИТАН ҚҰРЫЛЫМДАРЫН АЛУДЫҢ ӘДІСТЕРІН ДАМЫТУ ЖОЛЫНДАҒЫ ЗАМАНАУИ ЖЕТІСТІКТЕР

Бірегей құрылымдық, механикалық және химиялық қасиеттерінің арқасында кеуекті титан қазіргі медицинаның перспективті биоматериалдарының бірі болып табылатыны белгілі. Биоүйлесімділік, беріктік және инерттілік сияқты қасиеттер титан мен оның қорытпаларын ортопедия, травматология және стоматология саласындағы заманауи имплантологияның негізгі материалы етеді. Кеуекті титан биоматериалдарының тығыз металл материалдардан артықшылығы – оның сүйек тінімен жақсы байланысы және тұрақтандыруы болып табылады, бұл импланттың жоғалу қаупін азайтады. Байланыстырылған тері тесігі тіндердің сіңуіне ықпал етеді, осылайша протездің қоршаған сүйекке бекітілуі имплантацияның әлсіреуіне жол бермей, күшейеді. Келтірілген мақала кеуекті титанның құрылымдарын алу әдістері туралы қазіргі заманғы әдебиеттерге шолу, алынған материалдың негізгі физикалық қасиеттерін талқылау және биомедицинадағы қолдану мысалдарының сипаттамасы болып табылады. Мақалада кеуекті титаннан құрылымдырын алудың кеңінен таралған заманауи әдістерінің сипаттамасы келтірілген. Қорытындылай келе, кеуекті титан құрылымдарының алу және қасиеттерін зерттеу әдістерін дамыту мәселесінің қазіргі жағдайына баға беріліп және болашақта оның дамуы туралы кейбір болжамдар айтылады.

**Түйін сөздер**: кеуекті титан, кеуеті металдар, жентектеу, электрохимиялық жеміру, биомедицина.

G.K. Mussabek<sup>1\*</sup>, M.N. Kalimoldayev<sup>1</sup>, V. Lysenko<sup>2</sup>, K.K. Dikhanbayev<sup>1</sup>, Sh.B. Baiganatova<sup>1</sup>, G.A. Amirkhanova<sup>1</sup> <sup>1</sup>Institute of Information and Computational Technologies, Kazakhstan, Almaty <sup>2</sup>Claude Barnard University of Lyon, Light-Matter Institute, France, Lyon \*e-mail: gauhar-mussabek@mail.ru

Recent advances in the development of methods for producing of porous titanium structures for medical applications

Due to the unique structural, mechanical and chemical properties, porous titanium is one of the promising biomaterials of modern medicine. Such properties as biocompatibility, strong mechanical strength, inertness make titanium and its alloys the main material of modern implantology in the field of orthopedics, traumatology and dentistry. The advantage of porous titanium biomaterials over dense metals is its better interconnection with bone tissue and providing better stabilization, which reduces the risk of implant loss. The connected pores contribute to tissue ingrowth and thus the attachment of the prosthesis to the surrounding bone becomes stronger, preventing the weakening of the implant. This article is a review on modern methods for obtaining porous titanium structures, discussions of its physical properties and descriptions of usage in biomedical applications. The paper provides information on both general methods for the formation of porous metal structures and a description of the most common modern methods for obtaining and studying the properties of structures of porous titanium is given and some predictions for its development in the future.

Key words: porous titanium, porous metals, sintering, electrochemical etching, biomedicine.

Г.К. Мусабек<sup>1\*</sup>, М.Н. Калимолдаев<sup>1</sup>, В. Лысенко<sup>2</sup>, К.К. Диханбаев<sup>1</sup>, Ш.Б. Байганатова<sup>1</sup>, Г.А. Амирханова<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт информационных и вычислительных технологий, Казахстан, г. Алматы <sup>2</sup>Лионский университет им. Клода Бернара, Франция, г. Лион \*e-mail: gauhar-mussabek@mail.ru

# Современные достижения в области развития метов получения структур пористого титана для медицинского применения

Благодаря уникальным структурным, механическим и химических свойствам пористый титан является одним перспективных биоматериалов современной медицины. Такие свойства как биосовместимость, прочность, инертность делают титан и его сплавы основным материалом современной имплантологии в области ортопедии, травматологии и стоматологии. Преимущество пористых титановых биоматериалов перед плотными металлическими заключается в его лучшей взаимосвязи с костной тканью и обеспечением лучшей стабилизации, что приводит к снижению риска потери имплантата. Связанные поры способствуют врастанию ткани и, таким образом, крепление протез к окружающей кости становится крепче, предотвращая ослабление имплантата. Настоящая статья представляет собой обзор данных современных литературных источников, сообщающих о методах получения структур пористого титана, обсуждению основных физических свойства получаемого материала и описанию примеров применения в биомедицине. В работе представлена информация как об общих методах формирования пористых металлических структур, так и описание наиболее распространённых современных методов получения структур пористого титана. В заключении приведена оценка состояния проблемы развития методов получения и исследования свойств структур пористого титана и приведены некоторые прогнозы на ее развитие в будущем.

Ключевые слова: пористый титан, пористые металлы, спекание, электрохимическое травление, биомедицина.

## 1 Кіріспе

Казіргі таңның озық технологиялары қасиеттері ерекше тартымды наноөлшемді материалдарды қолданумен тығыз байланысты екені анық. Зерттеушілердің қызығушылығын тудырып, назарларын тарып отырған осындай наноөлшемді материалдардың ішінен кеуекті наноматериалдар классын бөліп атап айтсақ болады. Қызығушылық аталмыш наноматериалдардың көлемдік модификацияларына қарағанда күрт өзгеше физикалық және химиялық қасиеттерге ие болуына байланысты. Кеуекті наноматериалдардың осындай ерекше қасиеттері оларды микро-және наноэлектроника [1], медицина [2], жеңіл және ауыр өнеркәсіп [3], энергетика [4] және қоршаған ортаны қорғау [5] сияқты салалардың болашағы зор материалдарына айналдырған. Осыған орай кеуекті наноқұрылымды материалдарды алу технологияларын жетілдіру және оларды қолдану заманауи материалтану саласының ең өзекті сұрақтарыың бірі болып табылады.

Кеуекті наноматериалдардың ішінде кеуекті металдардың мен метал қорытпаларының қолданбалы мәртебесі ерекше артуда. Осындай материалдар қатарына енетін кеуекті титан құрылымдарының қолданылу аясы адамзат үшін өте маңызды денсаулық сақтау және биомедициналық жетістіктерді арттыру жөнінде кең ауқымды таралуда [6]. Сондай-ақ кеуекті титан қаптамалары сүйек имплантологиясы мен тіс ортопедиясында қолданыс тапқан [7]. Мұның себебі кеуекті титанның жоғары биоүйлесімді және уландыру қабілеті төмен болуында. Мамандардың титан негізіндегі кеуекті құрылымды қабықшаларды зерттеуінің бірден бір себебі олардың бірегей физикалық және химиялық касиеттері, биологиялық қабылдануы, сенсорлық және оптикалық қасиеттері мен катализдік белсенділігіне байланысты. Осындай кеуекті микро- және наноқұрылымды титан қабықшаларын алудың заманауи әдістері, олардың физикалық қасиеттері және қолдану аясына қықаша тоқталып өтейік.

#### 2 Титан туралы жалпы мәлімет

Титан ерекше қасиетті жәңіл әрі берік метал болып танылады. Элементтердің периодтық жүйесінде IV топтағы химиялық элемент, атомдық нөмірі 22, атомдық массасы 47,88. Табиғатта массалық саны 46-50 болатын титанның жасанды жолмен алынатын тұрақты 5 радиоактивті изотопы белгілі. Титан – жер бетінде кең таралған элементтердің бірі, оның Жер қыртысындағы салмақ мөлшері шамамен 0,57% құрайды. Титанның тығыздығы 4,505 г/ см<sup>3</sup>, балқу температурасы 1668°С және қайнау температурасы 3330°С құрайды [8].

Титан химиялық активті ауыспалы элемент, оның тотығу дәрежесі көбінесе +4 тең болады, сирек жағдайда +3 және +2 дәрежеде кездеседі. Титанды жоғары тазалықта алу өте қиын, алғанымен сол таза қалпында сақтап қалу да оңай емес. Сондықтан да таза титанға ие болып қана коймай, оны сыртқы әсерлесулерден де сақтау керек. Сыртқы орта температурасы 500-550°С-қа дейін жетпей метал бетінде оксид қабаты пайда болмайды, сондықтан ол ауада, теңізде, ылғал хлор ортасында, хлоридтер мен азот қышқылы ерітінділерінде, күкірт қышқылы мен сілтілердің сұйытылған ерітінділерінде коррозияға тұрақты болады. Бөлме температурасында титан HCl, H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, CCl<sub>2</sub>COOH, HCOOH қышқылдарымен эрекеттеседі, ал қыздырғанда оттегі (400-500°С), азот (600°С-тан жоғары), көміртек және кремниймен (1800°С-тан жоғары) әрекеттесіп, сутегі және басқа да ауа газдарын өзіне сіңіреді. Титан фтормен 150°С-та, хлормен 300°С-та, иодпен 550°С-та эрекеттесіп, сәйкес галогенидтерін түзеді. Одан бөлек бор, көміртек, селен, кремниймен әрекеттесіп, металға ұқсас қосылыстар түзеді. Титан қосылыстарының балқуы қиын, өте қатты, түстері әр түрлі болып келеді [9].

Титанды өндірісте алу үшін кентас концентраттарын хлорлап, алынған хлорлы концентраттарды магниймен (кейде натриймен) тотықсыздандырып, титан кірмесін (губка) алады. Кейін титан кірмесін вакуумдық доғалы пештерде балқытып, кесек метал алынады.

Осындай физикалық және химиялық қасиеттеріне байланысты титанды «болашақтың металы» деп атайды. Алғашында титанды әскери және қорғаныс мақсатында шығарып, қолдана бастады. Бірақ күннен күнге бұл металдың колданыс аясы әр түрлі облыстарда артып келеді. Титанның қолданыс аясының ең маңызды және кеңінен таралған салалары 1 суретте көрсетілген. Титан өнімін қолданатын негізгі өнеркәсіп авиақұрылыс болып табылады. Дәл осы салада титан қолданыстарының кеңеюі ары қарай авиациялық титан өндірісінің қалыптасып, өркендеуіне себеп болды. Өзінің физикалықмеханикалық қасиеттеріне байланысты титан қорытпалары әмбебап конструкциялық материал болып табылады. Сондай-ақ, аталмыш метал ғарыштық тахникасында жиі қолданылатын материал екені анық. Титанның көмегімен авиациядағы дыбыстық кедергілерді еңсеріп, ғарыштық кеңістікке шығуға жол ашылды. Ғарыш аппараттарының құрылысында және

ғарыштық техникада титан іс жүзінде таптырмас метал. Титан және оның қорытпаларының негізінде жасалатын әр түрлі функциялы бөлшектердің беріктігі мен сенімділігі машина жасау саласының озық дамуының бірден бір себебі болып отырғанына күмән жоқ.

Заманауи медицинаның хирургия, травмотология, стоматология және имплантология салалары титанның ерекше тұтынушылары деп айтуға болады. Титан қорытпаларынан жеңіл, сенімді, берік хирургиялық аспаптар жасалынады. Одан бөлек титан және оның негізіндегі қорытпалар травмотология, ортопедия және стоматология салаларында имлантаттар мен протездерді шығаруда қолданылады [10].

## 3 Қеуекті металдарды алу әдістері

Материалдарды зерттеу мен жаңа қасиеттерін қолданудың ғылыми салалары алға басып, кеуекті металдардың микро- және наноқұрылымдары медицина мен техниканых көптеген салалрынан қолданыс таба бастады. Бастапқы материалдың негізгі қасиеттерін сақтай отырып, кеуекті металдардың жылу- мен электрөткізгіштігі әлдеқайда төмен, ал олардың дыбысжұтушы және демпфирлеуші қасиеттері жоғары болады.

Кеуекті метал (КМ) бастапқы анықтамасы бойынша металдық көбік болып табылады. КМ бірыңғай орналасқан көптеген қуыстар мен қосқыштардан тұратын ұяшықты құрылым. Кеуекті металдарды алудың өзара айырмашылығы түбегейлі болатын бірнеше технология ұсынылған. Кеуекті металдардың құрылымын байланыстырушы әдістері ретінде желімдеу, дәнекерлеу және диффузиялық жентектеу қолданылуы мүмкін. Зерттеушілердің асқан қызуғушылығы әсіресе титан, алюминий, никель, мыс және олардың қорытпаларының кеуекті модификацияларына ерекше артуда. Бұл материалдарды алу технологияларын дамыту және қасиеттерін зерттеуге арналған ғылыми жаңа ізденістер оларды функционалды қолданудың аясын кеңейтеді [11].

Кеуекті металдарды құрылымдарына қарай «жабық» және «ашық» кеуекті металдық құрылымдар деп екі үлкен топқа бөлуге болады. Жабық кеуекті құрылымдарда әрбір қуыс (кеуек) жұқа металдық мембраналармен толығымен жабылып тұрады, ал ашық кеуекті құрылымдарда кеуектер бір бірімен байланыста тұрады. Мысалы, жабық және ашық кеуектері бар құрылымдардың салыстырмалы бейнелері 2 суретте көрсетілген.





2-сурет – Кеуекті метал құрылымдарының типтері: жабық (а) және ашық (б) [12]

Газ фазасынан отырғызу қондырғылары қолданылатын әдістер кеуектердің өлшемдерін, олардың таралуын және өзара байланысын жоғары деңгейдегі реттеу мүмкіндігін береді. Мұндай әдістердің көмегімен геометриясы ашық кеуекті металдар алынады. Көбіктеу реагенттерін балқытылған немесе ұнтақ күйіндегі метал матрицаларына ыдырату процестеріне негізделген әдістер нәтижесінде кеуектілігі төмен және кеуектердің таралу сипаты болжауға қиын құрылымдардың түзілуіне әкеледі. Мұндай әдістердің көмегімен геометриясы жабық кеуекті металдар алынады [13]. 3.1 Жабық кеуекті метал құрылымдарын алу әдістері

Балқыма және ұнтақтық металлургия әдісі Жабық кеуекті метал көбіктерінің құрылымы көптеген жан-жақты шектелген қуыстардан тұрғандықтан, олардың сүйек тіндерімен биоүйлесімділігі төмен болады, бірақ жүктемелік ортопедиялық имплантаттарда қолданылуы әбден мүмкін. Негізінен жабық кеуекті металдарды алудың екі әдісі белгілі. Олар: балқымажәне ұнтақтық металлургиялық әдістері. Бірінші әдісте көбік тәрізді кеуекті құрылым метал балқымасы арқылы газдың инжекциясы

немесе сұйық металға көпіртуші газ реагенттерін косу процестері жузеге асады [14]. Мұндай эдістер кеуекті алюминий, цинк және магний құрылымдарын алуда қолданылса, титан үшін балқу температурасы өте жоғары және оттегімен жылдам эрекеттескендіктен тиімсіз болып шықты. Екіншіден, ұнтақтық металлургиялық эдісі қуыс сфераларды өзара күйдіру немесе ТіН, сияқты газ қосылған реагенттері бар қысылған ұнтақты балқыту процестеріне негізделген [15]. Бұл әдіс салыстырмалы біртекті құрылымдарды алуға мүмкіндік береді және қиын балқитын металдар мен метал қорытпаларының өндірісінде қолданылуы мүмкін. Осындай әдістермен алынатын жабық кеуекті металдардың төзімділік шегін қоспаларды оңтайланған мөлшерде косу және соның есесінде кеуектердің біртекті таралуы аркылы жоғарылатылуы мүмкін.

## Плазмалық шашырату әдісі

Жабық кеуекті металдық құрылымдарды алудың басқа әдісі плазмалық шашырату болып табылады. Бұл әдіс қатты кедір-бұдыр беттік текстураларды, қатты беттердегі кеуекті каптамаларды және толығымен кеуекті құрылымдарды алу үшін мүмкіндік береді. Плазмалық шашырату процесінін сұлбалық көрінісі 3 суретте келтірілген. Плазмалық шашырау процесі кезінде сумен суытылатын екі электродтың арасында электрлік доға пайда болады. Осы электрлік доға газды ішінара ионизациялап аса жоғары температураларға дейін (20 000° С) қыздыруы негізінде плазмалық ағын түзеді. Газдар аса жоғары кеңеюдің әсерінен үдетіліп, анодтың касынан жоғары жылдамдықпен өтеді. Метал ұнтағы плазма ағынына тасымалдаушы газдың көмегімен қосылады және үдетіліп жоғары жылдамдыққа ие болады. Метал ұнтағының түйіршіктері плазма ағынында балқып, жоғары кинетикалық энергиямен төсеніштің бетіне түседі. Плазмалық шашырау параметрлерін өзгерту арқылы кеуектілігі градиентті түрде біртіндеп өзгеретін кеуекті қаптамаларды алуға болады [16].



3-сурет – Плазмалық шашырату процесінің сұлбалық көрінісі [16]

3.2 Ашық кеуекті метал құрылымдарын алу әдістері

## Ұнтақтық металлургиялық пісіру әдісі

Кеуекті металдық көбіктерді алудың ең қарапайым тәсілі метал ұнтақтарын пеште жентектеу кезіндегі ішінара тығыздану құбылысына негізделген. Бұл тәсіл ұнтақтық металлургиялық әдіс немесе жетілген метал түзу технологиясы деп аталады. Сондай-ақ, әдіс беті кеуекті және толығымен кеуекті метал құрылымдарын алуда кеңінен қолданылады. Бұл технология метал ұнтақтарын компактілеу, өзара байланыстыру

жентектеуге негізделген. Жентектеу және операциясы жоғары температуралық өңдеу болып табылады және метал түйіршіктерінің пішіндерінің аз өзгеруімен қатар келетін байланысу процесіне әкеледі. Көбінесе осындай процестерде арнайы байланыстырғыш заттар түйіршіктерді өзара байланыстырып, берік ұстау үшін қолданылады. Кеуектіліктің көлемдік фракциясы түйіршіктердің өлшемдері мен өзара байланысқандығына тәуелді. Кеуектілік ұнтақтың престеу тығыздығы, жентектеу температурасы мен уақыты және қорытпа

қоспаларының мөлшерімен анықталады. Кеуектердің өлшемдерінің ұнтақ түйіршіктерінің өлшемдері мен пішіндеріне тәуелділігі металлургиялық жентектеу әдісінің шектелуі болып табылады. Мысалы, ұнтақ түйіршіктерінің пішіні сфера тәрізді болса, кеуектілік 50%-дан аспайды және кеуектердің пішіні кездейсоқ болып түзіледі [17]. Осы әдісте қолданылатын метал түйіршіктерінің орташа өлшемдері 50 мкм – 1 мм аралығында болады. Мысалы, [18] жұмысының авторлары металлургиялық жентектеу әдісін қолданып, кеуектілігі 5-37% болатын кеуекті титан қаптамаларын алып, қасиеттерін зерттеген. Таза титан және титан қорытпаларының кеуекті құрылымын алу үшін қолданылатын жентектеу процесі оттегі жоқ, жоғары вакуумды (10-5 мбар) пештерде 1250 С температурасында жүзеге асырылуы тиіс.

Толтырғыш көмегімен кеуектерді түзу әдісі

Толтырғыш көмегімен кеуектерді түзу әдісі – кеуектілігі жоғары кеуекті металдар үлгілерін алу үшін арналған әдіс. Процесс метал ұнтағының толтырғыш материалымен араластырылуынан басталып, қоспаның таблеткаға престелуімен жалғасады. Таблетка толтырғыш атомдарын алып, метал түйіршіктерін өзара байланыстыру үшін төмен температурада қыздырылады. Бұл процесте құрылымның бастапқы қаңқасы түзіледі.

Келесі сатыда жоғары температуралық жентектеу процесі жүзеге асырылады. Жоғары температуралық жентектеу кезінде құрылымның тығыздануы және ішінара байланыстардың нығаюы бақыланады. Бұл әдісте қолданылатын метал ұнтақтарының түйіршіктерінің өлшемдері толтырғыш ұнтағы түйіршіктерінің орташа өлшемдерінен кіші болуы тиіс. Толтырғыш көмегімен кеуектерді түзу әдісі біртекті, жоғары кеуекті (60-80%) метал құрылымдарын алуға мүмкіндік береді [19]. Толықтырғыш ұнтағы түйіршіктерінің пішіндері, өлшемдері және мөлшерін өзгерту арқылы кеуекті метал құрылымдарының механикалық қасиеттерін өзгертіп отыруға болады. Толықтырғыш материалын престелген үлгі көлемінен ажырату аталған әдістің ең басты қиыншылығы болып табылады. Мысалы, [20] жұмысында толықтырғыш ретінде карбамид (мочевина) ұнтағын пайдаланып, оның титан ұнтағын минималды ластауменен 200 ПС төмен температураларда ұшыртуға болатынын көрсетті. Кеуектілігі 60-70% және кеуек өлшемдері 0.1-0.24 мм болатын құрылымдар бір сағат ішіндегі 1400 ПС температурасында жоғары температуралық жентектеу нәтижесінде алынды. Ал Вен және басқалар [21] толықтырғыш ретінде 200 ПС температурасында ыдырайтын аммоний гидрокарбонат ұнтағын қолданды. Жоғары температуралық жентектеу 1200 ПС температурасында 2 сағат ішінде жүзеге асырылды. Нәтижесінде кеуектілігі 78%, сығу кернеулігі 35 МПа және Юнг модулі 5,3 ГПа болатын металдық құрылым алынған.

## Репликация әдісі

Репликация әдісі – кеуектілігі жоғары метал материалдарды алу үшін арналған 3 сатыдан тұратын әдіс. Әдістің орындалу сатылары сызба түрінде 4 суретте келтірілген. Ли және эріптестері [22] бұл әдісті кеуектілігі жоғары таза титан және титан қорытпаларының кеуекті құрылымдарын алу үшін алғаш ұсынған. Ғылыми топтың жүргізген тәжірибелерінде бірінші полиуритан көбіктері Ті-6АІ-4V қорытпасының ұнтағы (70 көлемдік пайыз), Н<sub>2</sub>О (20 көлемдік пайыз) және аммоний қосылған ерітіндіге белгілі бір уақыт ішінде батырылып, шығарылады және кептіріледі. Процесс полиуритан көбігі Ті-6АІ-4V ұнтағымен толығымен қапталғанға дейін бірнеше рет қайталанады. Одан кейін жоғары температуралық қыздыру нәтижесінде полиуритан қаңқасы ыдырап, орнында кеуекті метал құрылымы қалады. Бұл – ашық кеуекті метал құрылымдарын алуының бірден бір әдісі.



4-сурет – Репликация әдісінің үш сатылық жүзеге асырылу сызбасы [23]

## 4 Кеуекті титан құрылымдарын алу әдістері

Кеуекті титан қабықшаларын алудың көптеген әдістері белгілі. Солардың ішіндегі негізгі және кең таралғандары: ұнтақты металлургия әдісі, химиялық әдіс және электрохимиялық жеміру әдісі.

Ұнтақты металлургия әдісі

Ұнтақты металлургия әдісінің аса маңызды бағыттарының бірі кеуекті ұнтақ материалдар дайындау болып табылады. Мұндай материалдар минералдардың, синтетикалық майлардың, жеңіл балқитын металдардың, сілтілердің, қышқылдардың және басқа да агрессивті сұйық орталардың сүзгіштері ретінде қолданады [24].

Бұл әдіспен кеуекті титан қабықшаларын алу дайын титан ұнтағын престеп, үлгі бетіне қыздырып орналастыру арқылы жүзеге асады. Ұнтақты металлургия әдісімен алынған көп қабатты кеуекті титан қабықшаларының бейнесі 5 суретте сатылы түрде көрсетілген [25].



5-сурет – Кеуекті титан қабықшаларын алудың ұнтақтық металлургия әдісінің жүзеге асырылу сатылары

Ұнтақты металлургия әдісімен алынған кеуекті құрылымды үлгілердің өлшемдері 100-300 мкм көлемінде болады. Алайда үлгілердің өлшемдері наноөлшемге жетпегендіктен бұл әдісті қолдану кейбір қолданыстар үшін тиімсіз болып келеді.

### Химиялық жеміру әдісі

Жеміру дегеніміз – металдардың сыртқы ортамен химиялық немесе электрохимиялық жолмен әрекеттесуі кезіндегі сегменттік еруі. Химиялық жеміру (ХЖ) процесін күшейту және үдету мақсатында әртүрлі физикалық процестер қосылады. Негізінен, ХЖ-дің химиялық және электрохимиялық түрлері белгілі.

Химиялық жеміру кезігнде металдардың еруі жүйеде ешқандай каталитикалық әсер етуші факторлар мен процестердің көмегінсіз жүреді. ХЖ кезінде металдардың беткі қабаттарының әр түрлі газ немесе сұйық фазассындағы электролиттермен әрекеттесуі нәтижесінде кристалдық торлары бұзылып, жаңа құрылымдар пайда болады. Мысал ретінде [26] жұмыстың нәтижелерін келтіруге болады. Мұнда кеуекті титан қабықшаларын ХЖ әдісімен алу үшін диск пішінді, маркасы GR2 монокристалды титан төсеніштері қолданылған. Қалыңдығы 2 мм болатын титан дисктерін алмаз кескішпен төртке бөліп, әр түрлі технологиялық жағдайда үлгілер тобы алынған, үлгілердің фотосуреті 6 суретте келтірілген.

Улгілер мен химиялық жеміргіш ерітінді арасындағы реакция өңделініп тұрған үлгілердің бетінен материал шығынына алып келеді. ХЖ әдісі материал құрамына, жеміргіш ерітінді және температураға тәуелді. Химиялық жеміру әдісі экзотермиялық процесс болғандықтан, жүйе қызып кетеді. Жеміргіш ерітіндінің белсенділігі температураға қатты тәуелді және оптималды температураның мәні 30° екендігі анықталды. Химиялық жеміру кезінде кеуектердің байда болуы мен төсеніштің ішіне қарай таралуы біркелкі болуы үшін процесс ультрадыбыстық ваннада жүргізілді. Зерттеу нәтижесінде жеміру уақыты 30 секунд, жеміру ерітіндісі ретінде 9% фторсутек қышқылы және 12% азот қышқылы қосылған дистилденген су жемірудің оптималды параметрлері болып анықталды.



6-сурет – Маркасы GR2 монокристалды титан төсеніштерінің бетіндегі химиялық жеміру әдісімен алынған кеуекті титан қабықшаларының планарлы фотосуреті [26]



7-сурет – Ультрадыбыстық ваннада титан төсенішінің бетін химиялық жеміру процесінің сұлбалық келтірілуі [27]

#### Электрохимиялық жеміру әдісі

Электрохимиялық жеміру (ЭХЖ) – белгілі бір жүйенің ішінде электр тогын беру арқылы электролит ерітінділерінде жемірілуші материалдың еруі. Жемірудің бұл түрі металдардың дымқыл ауамен немесе электролиттермен жанасуы кезінде жүзеге асады. Бұл әдіс кеуекті құрылымдарды алудың қазіргі таңдағы ең қолжетімді және қарапайым әдістердің бірі деп айтуға болады. ЭХЖ әдісімен кеуекті титан қабықшаларын алу үшін қолданылатын электролиттердің құрамына С<sub>2</sub>H<sub>6</sub>O<sub>2</sub>:H<sub>2</sub>O:NH<sub>4</sub>F, H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, H<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>, NaCl сияқты заттар кіргізіледі.

Мысалы, Лу және әріптестері [28] осы ЭХЖ эдісімен супергидрофобты титан үлгілерін алып, беттік морфологиясын және үлгілердің химиялық құрамын зерттеген. Өз тәжірибелерінде олар анод ретінде өлшемдері 20мм×20мм×2мм болатын титан төсеніштері қолданған. Катод ретінде өлшемдері дәл титан үлгілеріне сәйкес келетін мыс пластиналары алынды. Анод және катод бір бірінен 10 мм қашықтықта 0.2 моль-1 натрий хлориді электролитінде бетпе-бет орналастырылды. Электролитті араластыру үшін магнитті араластырғыш қолданды. Ток тығыздығы 1 А/см<sup>2</sup> құрайтындай алынған. ЭХЖ уақыты 1 минуттан 12 минутка дейін өзгеріп отырды. Бұл процестен кейін үлгілер ультрадыбыстық тазартқышта дистилденген сумен жуылып, артынан кептірілді. Жұмыс электролиті ретінде бейтарап, экологиялық таза және арзан NaCl ерітіндісі қолданылды. Үлгілердің беттік морфологиясы сканерлеуші электрондық микроскопия көмегімен зерттелінсе, химиялық құрамы энергодисперсиялык спектроскопия және инфрақызыл спектрофотометр арқылы қаралды. Титан үлгілерінің беттік морфологиясының электрохимиялық жеміру жүргізілгенге дейін және кейінгі СЭМ көмегімен қаралған бейнелері 8 суретте 1000× және 20,000× үлкейтілумен көрсетілген. Микроқұрылымдар электрохимиялық өңдеу арқылы үлгілердің бетінде ғана пайда болғанын мәлімдеді.

Кеуекті титан құрылымдарын алудың осы аталған әдістердің көбісі жоғары температуралық өңдеу, вакуумдық қондырғыларды қолдану және энергетикалық жағынан қарастырғанда тиімсіз процестерді жүзеге асыруды талап етеді. Сондықтан кеуекті титанды алудың бірден бір тиімді әдістердің бірі электрохимиялық жеміру болып табылады. Бірақ, бұл әдісті қолдануда да кейбір ашық сұрақтар бар. Біріншіден, титанды электрохимиялық жеміру, өз кезегіне аз зерттелген әдіс болғандықтан, әлемдік ғылыми эдебиеттерде титанның электрохимиялық еру процесінің механизмдері әлі де толық анықталмаған. Екіншіден, осы уақытқа дейін қолданылып келе жатқан электролиттердің құрамында уландырғыш және биоуйлесімділігі төмен заттар болатын. Сондықтан біздің зерттеуіміздің мақсаттарының бірі электролит ретінде уландыру деңгейі төмен, этиленгликоль негізіндегі ерітіндіні қолдану болатын.



**8-сурет** – ЭХЖ уақыты 12 минут ішінде алынған супергидрофобты кеуекті титан құрылымдарының үлгілерінің СЭМ көмегімен алынған бейнелері [28]

## 5 Кеуекті титанның физикалық қасиеттері

## 5.1 Құрылымдық қасиеттері

Импланттар шығару үшін негізінен жетілдіріліп отырған кеуекті титанның меаникалық қасиеттері мен оларды анықтайтын құрылымдық қасиеттерінің маңызы зор. Кеуектілік кеуекті материалдың құрылымдық қасиеттерін анықтайтын бірден бір физикалық параметрі болып табылады. Кеуекті титан қабықшаларының кеуектілігі материалдың механикалық қасиеттерін анықтайды және материалдың қолдану аясын көрсетеді. Мысалы, төмендегі 9 суретте кеуектілігі әр түрлі кеуекті титан негізіндегі цилиндр пішінді брикеттердің бейнесі көрсетілген. Брикеттердің көлемдері бірдей болғанымен салмақтарында

айырмашылық бар. Брикеттердің арасында ауа неғұрлым көп болса, оның кеуектілігі соғұрлым жоғары болып келеді. Кеуектілігі 80% -дық брикет пен 60%-дық брикетті алып қарайтын болсақ, бірінші брикеттің құрамында 80% ауа бар дегенді білдіреді. Кеуектілігі артқан сайын материалдың иілгіштігі артады, алайда ол сыртқы күштің әсеріне шыдамсыз болып келеді. Кеуектілігі төмен брикеттер кернеулікке жақсы қарсы тұра алады. Мұндай материалдар өзіндік бағасы төмен болғандықтан имплантат дайындауда болашағы зор.

Жақында жүргізілген зерттеулердің нәтижелері сүйек тіндерінің тиімді өсуін ынталандыратын импланттың оңтайлы кеуектілігі 20–50% аралығында [29], ал кеуектердің өлшемдері 100– 400 мкм [30] аралығында болатындығын көрсетті.



9-сурет – Кеуектіліктері әр түрлі кеуекті титан брикеттері [31]

## 5.2 Механикалық қасиеттері

Кеуекті титанның механикалық қасиеттеріне токталғанда әдетте колданбалы жағынан өзекті материалдың келтірілген механикалық Юнг серпімділік ұзаруын, модулін және беріктігін айтады. Серпімділік модулі материалдық биомеханикалық үйлесімдігіне үлесі зор шама болып келеді. Гибсон және Эшби дамытқан математикалық модельдің көмегімен кеуекті материалдың серпімділік модуліне мейлінше әсер ететін салыстырмалы тығызанықтауға мүмкіндік береді [32]. дығын Әдетте кеуекті материалдардың салыстырмалы тығыздықтарының мәні шамамен 0,3-0,003 аралығында жатады, және кеуекті титан құрылымдыры үшін бұл шаманың мәндері 0,3-0,85 аралығында болады [33]. Салыстырмалы тығыздық құрылымдарды алу процесінде өзгертілуі мүмкін. Ашық кеуекті құрылымдар үшін серпімділік модулі мен салыстырмалы арасындағы тығыздылық катынас келесі теңдеумен сипаттауға болады [32]:

$$\frac{E}{E_s} = C_s \left(\frac{\rho}{\rho_s}\right) \tag{1}$$

мұндағы Е және  $E_s - қатты және кеуекті титанның сермімділік модільдері; <math>C_1 \approx 1$  геометриялық пропорционалдылық коэффициенті;  $\rho$  және  $\rho_s - сәйкесінше қатты және кеуекті титанның тығыздықтары.$ 

Келесі 10-суретте кеуектілігі 55-75% аралығында болатын жоғары температуралық жентектеу әдісімен алынған кеуекті титан улгілерінің келтірілген механикалық кернеуінің деформациялық ұзаруға тәуелділігі көрсетілген. Суреттен кеуекті титанның механикалық касиеттерінің қарапайым металдық қірмелердің касиеттерімен ұқсас екеніне көзімізді жеткізе аламыз. Графиктен деформацияның басында эластикалық деформация сатысы бақыланса, деформациялық ұзару жоғарылаған сайын механикалық кернеудің біртекті салыстырмалы тұрақты сатысы басталатыны анық. Осы екінші сатыда кеуектер қысылып деформацияға деформацияның ұшырайды. Механикалық келесі сатысы тығыздану аймағы деп аталады, мұнда механикалық кернеу дереу өсіп кеуекті материалдың көлемді титанның механикалық касиеттеріне ие болатынын көреміз. Тұрақты аймақтағы механикалық кернеудің шамасы 10-15 Мпа аралығында жатады және кеуектілік артқан сайын бәсеңдей түседі [34]. Әрбір жеке

алынған қисықтың сызықты аймағының көлбеу бұрышымен анықталатын серпімділік модулі де материалдың кеуектілігі артқан сайын төмендейді. Сермімділік модулінің максимум және минимум мәндері сәйкесінше 6,4 және 3 ГПа құрады.



10-сурет – Кеуектілігі 55-75% аралығындағы кеуекті титан үлгілерінің келтірілген механикалық кернеуінің деформациялық ұзаруға тәуелділігі [34]

Осылайша, кеуекті титанның механикалық қасиеттерін зерттеген кезде, зерттеушілер құрылымдық модификация Юнг модулін тығыз металдың мәнінен сүйекке дейінгі мәніне дейін төмендетуге мүмкіндік беретінін түсінді. Имплантанттың қаттылығын азайту үлкен қызығушылық тудырады, өйткені бұл механикалық кернеудің таралу сипатын жақсартады және сүйектерді қалпына келтіру жағдайларын жақсартады [35].

## 6 Кеуекті титанның биомедициналық қолданылуы

Соңғы 20 жыл ішінде кеуекті құрылымдар травматологияда, ортопедия, хирургия, стоматология, урология және медицинаның басқа да салаларында адам ағзасы үшін имлантация дайындауда қолданылып келеді [31, 36]. Ортопедиялық мақсатта қолданылатын материалдар үшін бірнеше ортақ критерийлер қарастыру керек. Бірінші критерий – ол биомедициналық қолданулар үшін қажетті қасиеттер қатары, мысалы, биоүйлесімділік, коррозияға жоғары төзімділік және тозуға төзімділігі. Сонымен қатар ортопедиялық имплантат арнайы механикалық қасиеттерге ие болуы керек. Атап айтқанда, таңдалған ортопедиялық имплантат сүйектің серпімділік модуліне сәйкес болуы шарт. Екіншіден, таңдалған материалды қажетті формаға өңдеу әдісінің жалпы бағасы да аз болуы тиіс [37].

Сүйек – кешенді васкулярлы жүйе мен ақуыз байланыстырушы негізіндегі ашық құрылымды композитті материал. Архитектуралық деңгейде қарастырсақ, сүйек өзара тығыз бекітілген екі типті сүйек тіндерінен тұрады. Сүйектің сыртқы қабаты тығыз кортикалық тіндерден, ал ішкі қабаттарының кеуекті трабекулярлы тіндерден тұратындығы белгілі. Кортикалық тіндердің тығыздығы өте жоғары және олар цилиндр пішінді остеондардан тұратын Гаверсиан жүйесін түзеді, сонымен қатар олардың өлшемдері 10-500 мкм аралығында жататындығы белгілі. Гаверсиан каналдары сүйектің бас өсіне параллель болатын қан тамырларынан тұрады. Бұл қан тамырлары сүйек бетіндегі қан тамырларымен перфорациялық каналдар арқылы өзара байланысады. Ал трабекулярлы тіндердің құрылымы керісінше, кеуекті болып келеді және диаметрлік өлшемдері 50-300 мкм болатын трабекулалар торларынан тұрады. Осы екі түрлі сүйек тіндерінің кеуектілігі мен тығыздықтары айтарлықтай әр түрлі. Кортикалық сүйек тіндерінің кеуектілігі 5-10% болса, трабекулярлы сүйек тіндерінің кеуектілігі – 75% және 90% аралығында жатады [38]. Кортикалық сүйектің тығыздығы 1,99 г/см<sup>3</sup> [39] болса трабекулярлы сүйектердің тығыздығы 0.05 – 1.0 г/см<sup>3</sup> [40] аралығында өзгеріп тұрады. Сүйектің механикалық қасиеттері олардың денедегі басқа сүйектермен, буындармен және бұлшық еттермен әсерлесулерімен анықталады. Сүйек анизотропты материал және оның механикалық қасиеттері оның анотомиялық орналасуымен анықталады [41].

Титан және оның қорытпалары өзінің тамаша механикалық қасиеттеріне, биоүйлесімділігіне және коррозияға тұрақтылығына байланысты ортопедия және стоматологиялық имплантат дайындауда кеңінен қолданылатын материалдар болып табылады [42]. Мысалы, Ті-6Al-4Vжәне NiTi қорытпалары ортопедиялық мақсатта жиі қолданылатын титан қорытпаларының бірі болып табылады [43]. Себебі титан қорытпалары басқа қоспалармен салыстырғанда құрамындағы элементтерінің улылығы төменболып келеді.

Соңғы екі онжылдықта титан және оның қорытпаларымен жұмыс жасайтын зерттеушілер ортопедиялық қолданылулар үшін жаңа қорытпалар ойлап тапты. Атап айтқанда, Ti-Nb-TaZr, Ti-Zr-Nb, Ti-Zr-NbTa-Pd, Ti-Sn-Nb және Ti-Ni-Ta [44] алынып, имплантат дайындауда биоматериал ретiнде қолданылды. Титан қорытпаларының көптеген түрiнiң механикалық касиеттерi ортопедиялық қолданулар үшiн жоғары үйлесiмдiлiкке ие. Болат және Со-Сr қорытпаларымен салыстырғанда титан қорытпаларының серпiмдiлiк модулi сүйектiң серпiмдiлiк модулiмен сәйкес келедi және теориялық тұрғыдан қарастырғанда кернеулерге қарсы қорғанысты аз қамтамасыз етедi. Төмендегi 11 суретте сүйек тiнiнде қолданылатын кейбiр маңызды материалдардың серпiмдiлiк модулi көрсетiлген.



11-сурет – Сүйек тінінде қолданылатын кейбір корытпалардың серпімділік модулдері [45]

Титан қорытпаларының Со-Сг-Мо қорытпаларымен салыстырғандағы мүмкін болатын ең қолайсыз механикалық қасиеттері: сызаттардың таралуын қабылдағыштығы, салыстырмалы жұмсақтығы және салыстырмалы төмен фрикциондық қасиеттері. Биоүйлесімділікке келетін болсақ, титан қорытпаларының беттік қабатында оксидтің қабаттың түзілмеуі олардың жетістігі болып табылады.

Сүйек тінінің имплантациясы құрамы ғана сай келетін материалды қажет етіп қана қоймай, олардың сүйек құрамымен және механикалық қасиеттерімен сәйкес болуын талап етеді. Ортопедиялық мақсатта қолданылатын имплантаттардың жетістігімен қатар адам ағзасында қолданылуы үшін біраз қиындықтар бар. Екі негізгі қиындықтардың бірі имплантат пен сүйек тінінің биомеханикалық қаттылығының сай келмеуі болса, екіншісі ретінде бастапқы отырғызу фиксациясы дұрыс болмаған жағдайда имплантаттардың микроқозғалыстарын атауға болады. Имплантатты қоршап тұратын сүйек тіндері шамалы механикалық күш әсерінен сүйекті зақымдауы мүмкін. Мұндай кездерде имплантатты ұстап тұрған сүйек те, имплантат та әлсіреуі мүмкін. Бұл айтылып кеткен қиындықтар ортопедиялық мақсатта қолданылатын имплантат дайындауда ескерілетін алғашқы мәселе болып табылады [46].

Сүйек тіндерінің кеуекті имплантат құрылымына қарай өсіп, берік өзара байланы түзу процессі остеоинтеграция деп аталады. Көптеген жылдар бойы зерттеушілер бұл процесті жақсартуға ұмтылды, өйткені сүйектердің нашар сіңіп өсуі имплантаттың әлсіреуіне әкелуі мүмкін және қайтадан ота қажет болып қалуының қатері жоғарылай түседі. Сондықтан мұндай тәжірибелердің басым көпшілігі негізінен тығыз биоматериалдардың кедір-бұдырлық және биологиялық белсенділік сияқты беткі параметрлерін өзгертуге бағытталған болатын. Кеуекті құрылымды қолдану металлдық биоматериал мен сүйек арасындағы механикалық адгезияны тіндердің кеуек қуыстанының ішіне сіңіп өсуі арқылы күшейеді [47]. Келесі 12 суретте ашық кеуекті имплантат бетінде сүйек тіндерінің сіңіп өсу процессінің модельдік бейнесі көрсетілген.



Тұрақты фиксация

12-сурет – Ашық кеуекті имплантат бетіне өсірілген сүйек тіні [48]

Остеоинтеграция процессі қолданып отырған материалдың кеуектілігіне, кеуектердің өдшемдері мен материалдың жалпы құрылымына байланысты болады [47]. Келесі [49] жұмыстың авторлары кіші өлшемді (шамамен 188 мм) кеуектер импланттық емдеудің басында тіндер ұлпаларының дифференциациясына ықпал етеді, ал үлкен кеуектер (313 мкм және жоғары) жасушалардың көбеюіне және сүйектің сіңіп өсуіне ықпал етеді деген қорытындыға келді. Сонымен қатар, кеуектер васқуляризация мен қоректі заттарды жеткізуді жеткілікті деңгейде қамтамасыз ету үшін өзара байланысқан болуы тиіс. Мысалы, Мур және әріптестері ұсынған зерттеулердің нәтижесінде сүйектердің тез сіңіп өсуіне кеуектілігі 75–85% болатын құрылымдар жағымды, ал титан импланттарын қолдану жағдайында үш өлшемді ашық кеуекті құрылым тиімді деген қорытындыға келген [50]. Осылайша, кеуектілік пен кеуек өлшемдері материалдың механикалық қасиеттеріне тікелей әсер ететін параметрлерболып табылатындығына көз жеткіземіз, сондықтан олар имплантацияның түріне (жүктеме көтеруші, жүктеме үлестіруші, каркас және т.б.) байланысты жақсы теңдестірілген болуы керек.

Сонымен қатар, остеоинтеграция процесі әр түрлі құрылымды кеуекті титан имплантаттарының үстінде зерттелінген болатын. Осындай зерттеу ізденістерінің бірі ртінде Беншарит және әріптестері [51] ұсынған іші қатты титаннан жасалып, сырты кеуектілігі градиентті болатын кеуекті титан құрылымдары бар стомотологиялық имплантаттарын атап айтсақ болады.

#### Корытынды

Корытындылай келе, қазіргі таңда кеуекті титан өзінің құрылымдық және механикалық касиеттеріне орай, әсіресе, биомедициналық қолданыстар үшін болашағы өте зор материал болып табылатындығына көз жеткіземіз. Кеуекті титанды алу үшін алуан түрлі физикалық және химиялық әдістер ұсынылған. Мақалада олардың ішіндегі кеңінен таралғандары: ұнтақты металлургия, плазмалық шашырату, электрофорез, химиялық жеміру және электрохимиялық жеміру сияқты әдістеріне тоқталып өтілген. Жұмыста кеуекті титан құрылымдарының қолданбалы аясы биомедицинаның имплант жасау саласы қарастырылғандықтан материалдың негізгі құрылымдық және механикалық қасиеттері қарастырылған. Келтірілген ақпараттан кеуекті титан және оның қорытпаларынан жасалынған импланттар тәжірибе жүзінде тығыз металдардан жасалған бұйымдарға қарағанда артықшылықтары бар екендігі анық. Негізгі артықшылықтар кеуекті титанның механикалық қасиеттерінің сүйек тіндерінің механикалық касиеттеріне жақын болып, остеоинтеграция процесстерінің жүруін жеңілрек қамтамасыз ететіндігінде. Кеуекті титан импланттарын медицинада қолдануға болатындығына қарамастан, мұндай материалдардың клиникалық тұрғыдан кемшіліктері бар [48]. Біріншіден, алдын-ала жасалған импланттарды аномальды анатомиялық құрылымдар үшін қолдануға болмайды. Екіншіден, кеуектердің барлығы бір-бірімен байланыса амайды, бұл сүйекпен тіндерінің толтырылмайтын және материалдың оссеинтеграциясын төмендететін «соқыр аймақтардың» болуына әкеледі. Сондықтан мұндай импланттардың өндірістік хаттамалары жақсырақ бағаланып, медициналық мақсаттарға жарамды болуы керек. Дегенмен, ұсынылған шолудан кеуекті титанның жақын болашақта имплант жасайтын материал екендігі айқын.

#### Әдебиеттер

1 Sun X., Guo Yu., Wu Ch., Xie Yi. The hydric effect in inorganic nanomaterials for nanoelectronics and energy applications // Advanced Materials. – 2015. – Vol.27 (26). – P. 3850-3867.

2 Bharti Ch., Nagaich U., Pal A.K., Gulati N. Mesoporous silica nanoparticles in target drug delivery system: A review // Int. J. Pharm Investig. – 2015, -Vol. 5(3). – P. 124-133.

3 Park Ch.M., Chu K. H., J.Heo, Her N., Jang M., Son A., Yoon Ye. Environmental behavior of engineered nanomaterials in porous media: a review // Journal of Hazardous Materials. – 2016. – Vol. 309. – P. 133-150.

4 Bhanja P., Bhaumik A. Porous nanomaterials as green catalyst for the conversion of biomass to bioenergy // Fuel. -2016, -Vol. 185. -P. 432-441.

5 Ma Ya., Wang Z., Xu X., Wang J. Review on porous nanomaterials for adsorption and photocatalytic conversion of  $CO_2 // Chinese$  Journal of Catalysis. – 2017. –Vol. 38 (12). –P. 1956-1969.

6 Attar H., Ehtemam-Haghighi Sh., Soro N., Kent D., Dargusch M. S. Additive manufacturing of low-cost porous titaniumbased composites for biomedical applications: Advantages, challenges and opinion for future development // Journal of Alloys and Compounds. – 2020. –Vol. 827. –P. 154263.

7 Patka K., Pokrowiecki R. Porous titanium implants: A review // Adv. Eng. Mat. - 2018. Vol. 1700648. -P. 1-18.

8 Michael E., Holden N., Tyler B., John K. Atomic weights of the elements // Pure and Applied Chemistry. – 2013. –Vol.85(5). – P. 1047-1078.

9 Molchanova E.K. Phase diagrams of titanium alloys (Translation of atlas diagram sostoyaniya titanovyk splavov). – Israel: Jerusalem, 1965. – P. 65.

10 Шашкова Ю.Е. Применение титана и титановых сплавов для различных отраслей промышленности // Сфера нефтегаз. – 2011. – Т.2. – С. 1-2.

11 Крушенко Г.Г. Некоторые технологии получения пенометаллов из металлических расплавов и их применение // Технология металлов. – 2013. – Т.10. – С. 11–16.

12 Зефиров Н.С. Химическая энциклопедия // Советская энциклопедия. –1995. – Т.4. – С. 639.

13 Korner C., Singer R. Processing of metal foams-challenges and opportunities //Adv Eng Mater. - 2000.-Vol. 2. - P.159-165.

14 Banhart J. Manufacture, characterization and application of cellular metals and metal foams // Progr Mater Sci. -2001. - Vol.46. -P.559-632.

15 Salito A., Van Osten K.U., Breme F. Schonende Beschichtung-stechnik. –Montre: Sulzer Technical Review, 1998. – 145p. 16 Rausch G., Banhart J. Making cellular metals from metals other than aluminum. Handbook of cellular metals. – Weinheim: Wiley-VCH Verlag, 2002.–21p.

17 Oh I.H., Nomura N., Masahashi N., Hanada S. Mechanical properties of porous titanium compacts prepared by powder sintering // Scripta Mater.-2003.-Vol.49. -P. 197-202.

18 Ryan G., Pandit A., Apatsidis D.P. Fabrication methods of porous metals for use in orthopedic applications // Biomaterials. -2006.-Vol. 27.- P. 2651-2670.

19 Bram M. High-porosity titanium, stainless steel, and superalloy parts //Adv Eng Mater. - 2000.-Vol.2.-P. 196-199.

20 Wen C.E, Mabuchi M., Yamanda Y., Shimojima K., Chino Y., Asahina T. Processing of biocompatible porous Ti and Mg // Scripta Mater. -2001. -Vol.5. -P. 1147-1153.

21 Li J.P., Li S.H., de Groot K., Layrolle P. Preparation and characterization of porous titanium // Key Eng. Mater. -2002. - Vol.218. -P.51-54.

22 Kato K., Ochiai S., Yamamoto A., Daigo Y., Honma K., Matano S., Omori K. Novel multilayer Ti foam with cortical bone strength and cytocompatibility//ActaBiomater . -2013.-Vol.9. - P.5802-5809.

23 Eisenmann M. Porous powder metallurgy technology // Powder Metal Technologies and Applications. -1998. -Vol.7. -P.1031-1042.

24 Gubicza J., Fogarassy Z., Krallics G., Lábár J., Törköly T. Microstructure and mechanical behavior of ultrafine-grained titanium //Materials Science Forum. – 2008. –Vol.589. –P. 99–104.

25 Li L., Kong Y., Kim K. Improved biological performance of Ti implants due to surface modification by micro-arc oxidation //Biomaterials. -2004.-Vol.25. -P. 2867-2875.

26 Tajima K., Hironaka M., Chen K. Electropolishing of CP Titanium and Its Alloys in an Alcoholic Solution-based Electrolyte //Dental Materials Journal. –2008. –Vol. 27. –P. 258–265.

27 Lu Y., Xu W., Song J., Liu X., Xing Y., Sun J. Preparation of superhydrophobic titanium surfaces via electrochemical etching and fluorosilane modification // Applied surface science. -2012. - Vol. 263. - P.297-301.

28 Tanner A. Dental Implants Infections //Clinical Infectious Diseases. - 1997. -Vol.25. - №2. -P. 213-217.

29 de Vasconcellos L. M. R., Leite D. O., de Oliveira F. N., Carvalho Y. R., Cairo C. A. A. Evaluation of bone ingrowth into porous titanium implant: histomorphometric analysis in rabbits // Implantol. Braz. Oral. Res. – 2010. –Vol. 24. –P. 399.

30 Hollister S. J. Scaffold design and manufacturing: from concept to clinic // Adv. Mater. - 2009. - Vol. 21. - P. 3330.

31 He G., Liu P., Tan Q.B. Porous titanium materials with entangled wire structure for load-bearing biomedical applications // Behav. Biomed. Mater. -2012. -Vol.5. -P.16-31.

32 Gibson L., Ashby M. F. Cellular solids: structure and properties. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 1999.

33 Wally Z., van Grunsven W., Claeyssens F., Goodall R., Reilly G. Porous titanium for dental implant applications // Mater. Met. – 2015. – Vol. 5. – P. 1902.

34 Wenjuan N., Chenguang B., GuiBao Q., Qiang W. Processing and properties of porous titanium using space holder technique // Materials Science and Engineering A. -2009. –Vol.506. –P. 148–151.

35 Świeczko-Żurek B. Porous materials used as inserted bone implants //Advances in Materials Science. – 2009. – Vol.9. – No.2. – P. 52-60.

36 Zhang Y.P., Li D.S., Zhang X.P. Gradient porosity and large pore size NiTi shape memory alloys //Scripta Materialia. -2007.-Vol.57.-P. 1020-1023.

37 Nouri A., Hodgson P.D., Wen C. Biomimetic porous titanium scaffolds for orthopedic and dental applications. –Shanghai: China, 2010. –534p.

38 Burr D.B., Martin R.B. Errors in bone remodeling: toward a unified theory of metabolic bone disease //American Journal of Anatomy. -1989.-Vol.186.-P. 186-216.

39 Currey J. Cortical bone. – London: Chapman and Hall, 1998. – 35p.

40 Keaveny T.M. Cancellous bone. - London: Chapman and Hall, 1998. - 56p.

41 Silva G.A., Coutinho O.P., Ducheyne P., Reis R.L. Materials in particulate form for tissue engineering //Journal of Tissue Engineering and Regenerative Medicine. -2007.-Vol.1.-P. 97-109.

42 Niinomi M., Hattori T., Niwa S. Material characteristics and biocompatibility of low ridgidity titanium alloys for biomedical applications //Biomaterials in Orthopedics. –2004. – Vol. 22. –P. 41-62.

43 Lekston Z., Goryczka T. Phase transformation in Ti-Ni-Ta shape memory alloy solid-state phenomena //Applied Surface Science. -2007. -Vol.130. -P. 47-50.

44 Imwinkelried T. Mechanical properties of open-pore titanium foam //Journal of Biomedical Materials Research. –2007. – Vol.81A. –P.964–970.

45 Nouri A, Peter D., Wen H. Biomimetic Porous Titanium Scaffolds for Orthopedic and Dental Applications // Biomimetics, Learning from Nature. -2010. -P.534.

46 Laptev A., Bram M., Buchkremer H.P., Stöver D. Study of production route for titanium parts combining very high porosity and complex shape //Powder Metallurgy. –2004. –Vol.47. –P.85-92.

47 Wang Z., Wang C., Li C., Qin Y., Zhong L., Chen B., Li Z., Liu H., Chang F., Wang J., Analysis of factors influencing bone ingrowth into three-dimensional printed porous metal scaffolds: A review // J. Alloys Compd. – 2017. –Vol. 717. –P. 271-285

48 Lausma J., Kasemo B., Mattsson H. Surface spectroscopic characterization of titanium implant materials // Applied Surface Science. -1990. -Vol.44. -P.133-146.

49 Coelho P. G., Jimbo R., Tovar N., Bonfante E. A. Osseointegration: hierarchical designing encompassing the macrometer, micrometer, and nanometer length scales // Dent. Mater. – 2015. –Vol. 31. –P. 37.

50 Mour M., Das D., Winkler T., Hoenig E., Mielke G., Morlock M.M., Schilling A.F. Advances in porous biomaterials for dental and orthopaedic applications // Materials. – 2010. – Vol. 3(5). – P. 2947–2974.

51 Bencharit S., Byrd W. C., Altarawneh S., Hosseini B., Leong A., Reside G., Morelli T., Offenbacher S. Development and applications of porous tantalum trabecular metal □enhanced titanium dental implants // Clin. Implant Dent. Relat. Res. – 2014. –Vol. 16. –P. 817.

#### References

- 1 X. Sun et al. Advanced Materials. 27(26), 3850-3867 (2015).
- 2 Ch. Bharti et al. Int. J. Pharm Investig. 5(3), 124-133 (2015).
- 3 Ch.M.Park et al. Journal of Hazardous Materials. 309, 133-150 (2016).
- 4 P. Bhanja et al. Fuel. 185, 432-441 (2016).
- 5 Y. Ma et al. Chinese Journal of Catalysis. 38 (12), 1956-1969 (2017).
- 6 H. Attar et al. Journal of Alloys and Compounds. 827, 154263 (2020).
- 7 K. Patka et al. Adv. Eng. Mat. 1700648, 1-18 (2018).
- 8 E. Michael et al. Pure and Applied Chemistry. 85(5), 1047-1078 (2013).
- 9 E.K. Molchanova Phase diagrams of titanium alloys. (Israel: Jerusalem, 1965), p. 65.
- 10 Yu. E. Sphera neftegas. 2, 1-2 (2011). (In Russ).
- 11 G.G. Krushenko Technologiya metallov. 10, 11-16 (2013). (In Russ).
- 12 N.S. Zefirov Sovetskaya enciklopediya. 4, 639 (1995). (In Russ).
- 13 C. Korner, R. Singer Adv Eng Mater. 2, 159–165 (2000).
- 14 J. Banhart Progr Mater Sci. 46, 559-632 (2001).
- 15 A. Salito et al. Schonende Beschichtung-stechnik. (Montre: Sulzer Technical Review, 1998). p. 45.

16 G. Rausch., J. Banhart Making cellular metals from metals other than aluminum. Handbook of cellular metals (Weinheim: Wiley-VCH Verlag, 2002), p. 21.

- 17 I.H. Oh et al. Scripta Mater. 49, 197-202 (2003).
- 18 G. Ryan et al. Biomaterials. 27, 2651-2670 (2006).
- 19 M. Bram Adv Eng Mater. 2, 196-199 (2000).
- 20 C.E Wen et al. Scripta Mater. 5, 1147–1153 (2001).
- 21 J.P. Li et al. Key Eng. Mater. 218, 51-54 (2002).
- 22 K. Kato et al. ActaBiomater. 9, 5802-5809 (2013).
- 23 M. Eisenmann Powder Metal Technologies and Applications. 7, 1031-1042 (1998).
- 24 J. Gubicza et al. Materials Science Forum. 589, 99–104 (2008).
- 25 L. Li. Et al. Biomaterials. 25, 2867-2875 (2004).
- 26 K. Tajima et al. Dental Materials Journal. 27, 258-265 (2008).
- 27 Y. Lu, et al. Applied surface science. 263, 297-301 (2012).
- 28 A. Tanner Clinical Infectious Diseases. 25(2), 213-217 (1997).
- 29 L. M. R. de Vasconcellos et al. Implantol. Braz. Oral. Res. 24, 399 (2010).
- 30 S. J. Hollister Adv. Mater. 21, 3330 (2009).
- 31 G. He et al. Behav. Biomed. Mater. 5, 16-31 (2012).

32 L. Gibson, M. F. Ashby Cellular solids: structure and properties. (Cambridge, UK: Cambridge University Press, 1999), p.

- 77-97.
  - 33 Z. Wally et al. Mater. Met. 5, 1902 (2015).
  - 34 N. Wenjuan et al. Materials Science and Engineering A. 506, 148-151 (2009).
  - 35 B. Świeczko-Żurek Advances in Materials Science. 9 (2), 52-60 (2009).
  - 36 Y.P. Scripta et al. Materialia. 57, 1020-1023 (2007).
  - 37 A. Nouri et al. Biomimetic porous titanium scaffolds for orthopedic and dental applications (Shanghai: China, 2010) p. 534.
  - 38 D.B. Burr, R.B. Martin American Journal of Anatomy. 186, 186-216 (1989).
  - 39 J. Currey Cortical bone (London: Chapman and Hall, 1998), p. 35.
  - 40 T.M. Keaveny Cancellous bone (London: Chapman and Hall, 1998), p. 56.
  - 41 G.A. Silva et al. J. of Tissue Engineering and Regenerative Medicine. 1, 97-109 (2007).
  - 42 M. Niinomi et al. Biomaterials in Orthopedics. 22, 41-62 (2004).
  - 43 Z. Lekston, T. Goryczka Applied Surface Science. 130, 47-150 (2007).
  - 44 T. Imwinkelried Journal of Biomedical Materials Research. 81A, 964-970 (2007).
  - 45 A. Nouri et al. Biomimetics, Learning from Nature. 534 (2010).
  - 46 A. Laptev et al. Powder Metallurgy. 47, 85-92 (2004).
  - 47 Z. Wang et al. J. Alloys Compd. 717, 271-285 (2017).
  - 48 J. Lausma et al. Applied Surface Science. 44. -P.133-146 (1990).
  - 49 P. G. Coelho et al. Dent. Mater. 31, 37 (2015).
  - 50 M. Mour et al. Materials. 3(5), 2947-2974 (2010).
  - 51 S. Bencharit et al. Clin. Implant Dent. Relat. Res. 16, 817 (2014).

# 4-бөлім жылу физикасы және теориялық жылу техникасы

Section 4

THERMAL PHYSICS AND THEORETICAL THERMAL ENGINEERING

Раздел 4

ТЕПЛОФИЗИКА И ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ТЕПЛОТЕХНИКА IRSTI 28.17.23





Al-Farabi Kazakh national university, Kazakhstan, Almaty \*e-mail: Shynar.Ospanova@kaznu.kz

# INVESTIGATION OF THE LIQUID FUEL SINGLE-HOLE INJECTION IN THE COMBUSTION CHAMBER

On modern engines fuel injection has completely replaced the carburetor power system. But at the same time, among automakers there is still no consensus about which injection system is preferable, since each of them has its own advantages and limitations. In this work it was conducted the study of the atomization and combustion processes of single-hole injection of liquid fuel in a model chamber of the internal combustion engine. In this injection system air is mixed with fuel in the intake manifold, a complex and sensitive carburetor has been replaced by an injector, therefore this type of spray is called single-point. In multi-hole injection systems an individual injector is installed in the intake manifold of each cylinder, which supplies fuel directly to the intake valve. Thus, the fuel mixture is prepared immediately before being fed into the combustion chamber. Therefore, it turns out to be homogeneous in its composition and approximately the same in quality for each of the cylinders. As a result, this has a beneficial effect on the power and economy of the engine, as well as on the toxicity of exhaust gases. As a result of the computational experiments, the thermal and aerodynamic characteristics of the flow in the combustion chamber were obtained. The obtained computer simulation data were compared with experiments, which showed that the proposed in our work numerical model of liquid fuels spray adequately describes the real processes of atomization and combustion of various types liquid fuels.

Key words: atomization, single-hole injection, combustion chamber, liquid fuel, numerical simulation.

Ә. Асқарова, С. Бөлегенова, В. Мессерле,
С. Бөлегенова, Ш. Оспанова<sup>\*</sup>, М. Бодықбаева

Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Қазақстан, Алматы \*e-mail: Shynar.Ospanova@kaznu.kz

#### Жану камерасындағы бір ағыншалы сұйық отын бүркуін зерттеу

Заманауи іштен жану қозғалтқыштарында отынды бүрку әдісі карбюраторлық қоректендіру жүйесін толығымен алмастырды. Алайда, автокөлік өндірушілердің арасында қай жүйенің басымырақ екендігі туралы бірдей көзқарас жоқ, өйткені, әрбірінің өзінің артықшылықтары мен кемшіліктері бар. Берілген жұмыста іштен жану қозғалтқышының модельдік камерасындағы сұйық отынның бір ағыншалы бүрку және жану процестеріне зерттеу жүргізілді. Аталған бүрку жүйесінде ауа отынмен кіріс коллекторында араласады, күрделі, әрі сезімтал карбюратор инжектормен алмастырылады, сондықтан, аталған бүркү түрі бірнүктелік деп те аталады. Көпағыншалы бүрку жүйелерінде әрбір цилиндрдің кіріс түтігінде жеке форсунка орналастырылады, соңғысы отынды кіріс клапанына береді. Осылайша, отын қоспасы жану камерасына берер алдын әзірленеді. Сондықтан құрамы бойынша ол біртекті, әрі әрбір цилиндр үшін сапасы тұрғысынан бірдей болады. Нәтижесінде аталған қасиет мотордың қуаты мен үнемділігіне, шығыс газдардың улылығына жағымды әсер етеді. Жүргізілген есептеуіш тәжірибелердің негізінде жану камерасындағы ағыстың жылулық және аэродинамикалық сипаттамаларына қол жеткізілді. Алынған компьютерлік модельдеу нәтижелерін тәжірибелік мәліметтермен салыстырылу көрсеткендей, жұмыста ұсынылған тамшыларды бүркүдің сандық моделі әр түрлі сұйық отындарды бүрку және жану процестерін дұрыс сипаттайтындығы белгілі болды.

Ключевые слова: бүрку, бір ағыншалы бүрку, жану, сұйық отын, сандық модельдеу.

А. Аскарова, С. Болегенова, В. Мессерле, С. Болегенова, Ш. Оспанова<sup>\*</sup>, М. Бодыкбаева

Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Казахстан, Алматы \*e-mail: Shynar.Ospanova@kaznu.kz

# Исследование одноструйного впрыска жидкого топлива в камере сгорания

На современных двигателях впрыск топлива полностью вытеснил карбюраторную систему питания. Но при этом, среди автопроизводителей до сих пор нет единого мнения, какая система впрыска предпочтительней, поскольку каждая из них обладает своими достоинствами и недостатками. В данной работе было проведено исследование процессов распыла и горения одноструйного впрыска жидкого топлива в модельной камере двигателя внутреннего сгорания. В этой системе впрыска воздух смешивается с топливом во впускном коллекторе, сложный и чувствительный карбюратор заменен на инжектор, поэтому этот тип распыла получил название одноточечного. В системах многоструйного впрыска во впускном патрубке каждого цилиндра устанавливается индивидуальная форсунка, которая подает топливо непосредственно на впускной клапан. Таким образом, топливная смесь готовится непосредственно перед подачей в камеру сгорания. Поэтому она получается однородной по своему составу и примерно одинакова по качеству для каждого из цилиндров. В результате данное свойство благотворно сказывается на мощности и экономичности мотора, а также на токсичности выхлопных газов. В результате проведенных вычислительных экспериментов получены тепловые и аэродинамические характеристики течения в камере сгорания. Полученные результаты компьютерного моделирования были сравнены с экспериментальными данными, которые показали, что предложенная в нашей работе численная модель впрыска капель адекватно описывает реальные процессы распыла и горения различного вида жидких топлив.

Ключевые слова: распыл, одноструйный впрыск, горение, жидкое топливо, численное моделирование.

#### Introduction

Air pollution today is one of the pressing problems of large and industrial cities of the republic. Among them, the leading place in the concentration of harmful substances is the city of Almaty. This is due to natural, climatic, technogenic conditions: the location at the foot of the mountains, in an extremely unfavorable place for providing clean air, since the weak circulation of air masses, characteristic of mountainous terrain, contributes to the accumulation of harmful impurities in the air. Their main sources in Almaty are motor vehicles, industrial enterprises, the private residential sector using solid fuel heating, thermal power plants located near the city. The atmospheric air of the city is saturated with carbon monoxide, nitrogen dioxide and formaldehyde; the average concentration of these chemical elements is several times higher than the maximum permissible concentration established by sanitary standards. In recent years, the state of the air environment in Almaty has worsened due to an increase in the number of sources of pollution, especially the fleet of cars, unplanned construction of high-rise buildings that hinder the air flow, an increasing population and a reduction in green areas [1-4].

According to statistics, the annual volume of emissions of harmful substances into the atmosphere of Almaty is about 232 thousand tons. At the same time, 3 thousand tons are thrown away by industrial enterprises, 16 thousand tons – in the residential private sector and 23 thousand tons are produced by thermal power plants (Figure 1).

The largest share in the volume of air emissions falls on motor vehicles. This is 190 thousand tons or 80 percent of the total volume, incl. by pollutants included in the indicator of the air pollution index: suspended solids (soot) - 308.8 tons per year; carbon oxides - 145829.9 tons per year; nitrogen oxides - 17990.2 tons per year; sulfur oxides -1860.2 tons per year; formaldehyde – 133.9 tons per year; others (hydrocarbon, benzene, etc.) - 23977 tons per year. The impact of these pollutants on health is manifested in a wide range of biological effects: from an increase in the frequency of cough and other symptoms from the upper and lower respiratory tract, exacerbation of bronchial asthma, an increase in the incidence of bronchitis to an increase in cardiovascular diseases [5, 6].

As calculations and dynamics of growth of the main indicators show, the relationship between environmental pollution, the incidence of respiratory diseases in the population, the cost of the disease (government and private spending, nonproduced gross regional product) has a directly proportional relationship. There is a positive trend in all indicators. Accordingly, in order to reduce losses both from the state and the population, it is necessary to take measures to reduce environmental pollution, which will lead to a decrease in the incidence of diseases of the population, and, accordingly, to reduce the costs of the state and the population.





Figure 1 – The annual volume of emissions of harmful substances into the atmosphere of Almaty

In connection with the above, intensification of production, reduction of material consumption of equipment, economical consumption of fuel, and environmental protection are acquiring special significance and relevance. It is very important to create a scientific basis for intensive technological processes that ensure the integrated use of fuel and its waste, excluding the harmful effects of production on the biosphere. The new strategy for nature conservation and energy conservation involves the selection of the most effective achievements of scientific and technological progress. Among them, three main groups of measures stand out: utilization. energy modernization, intensive energy saving.

#### Physical statement of the problem

The heart of any car is an internal combustion engine, designed to convert chemical energy into mechanical energy. Gasoline and diesel engines are distinguished by fuel type. Mechanical energy moves the pistons up and down the inner cylinders. The pistons are connected to the crankshaft and the movement of the pistons, known as linear motion, creates a rotation of the shaft that drives the wheels.

Modern internal combustion engines use hightech fuel injectors to deliver fuel to the engine in the most efficient way. There are different types of fuel injection systems depending on the type of engine. The most commonly used engines are spark ignition (SI), port injection (PFI or GDI) and direct injection (DI) engines. In spark ignition engines, the injection pressure ranges from 2 to 3 bar, and in direct injection engines from 100 to 200 bar. Diesel engines with direct injection operate at much higher pressures, these values are about 10 times or more than spark ignition engines. Injection systems are usually electronically controlled, since the opening and closing of the injector must be quick, which reduces fuel waste [7-11].

In GDI engines, fuel is injected directly from several injector holes at a pressure of 200 bar. The multi-hole injection structure of the GDI engine is composed of combinations of fluid bundles and droplets of different sizes, and these are dependent on injection pressure. When liquid is injected, ringshaped injections are created in the engine. Typically, liquid bundles form at the inlet in the vicinity of the injector nozzle and the bundles break into droplets downstream due to interaction with air, which contributes to the growth of instability on the liquid surface. Droplet decay continues further downstream, which facilitates evaporation (Fig.2) [12, 13].

The combustion mechanism of liquid fuels in internal combustion engines includes several stages: a spark (or other external ignition source); ignition of the air-vapor mixture; combustion of the vaporair mixture at the surface of the liquid; increased evaporation rate due to the transfer of heat from the flame.



Figure 2 – Cross-sectional view of a gasoline direct injection (GDI) engine [12]: 1 – needle, 2 – valve, 3 – injector body, 4 – fuel drive,

5 - electrical connector, 6 - power drive, 7 - nozzle

One of the most fundamental differences between combustion phenomena is based on flame pre-mixing and diffusion processes. In the first case, all reagents are thoroughly mixed before the combustion process, and in the second, the fuel and oxidant are mixed until the stage of consumption. Apart from spark ignition engines, in almost all other internal combustion engine designs, the injected liquid fuel is not premixed.

Liquid fuels such as gasoline, diesel, light oil, fuel oil or kerosene are injected before combustion and must mix well with air. For these purposes, various types of nozzles are used. The injectors are divided into two groups: mechanical injectors and dual injection injectors. The perfection of the combustion of liquid fuel depends on the quality of its atomization, which is characterized by the distribution of droplets in size, the average diameter of the droplets, the opening angle and range of the jet, the amount of liquid passing per unit time through the unit of area of the free cross-section of the jet.

# Mathematical model of the liquid fuel atomization

The continuity equation for the reaction component m has the form [14]:

$$\frac{\partial \rho_{m}}{\partial t} + \vec{\nabla}(\rho_{m}\vec{u}) = \vec{\nabla} \left[ \rho D \vec{\nabla} \left( \frac{\rho_{m}}{\rho} \right) \right] + \dot{\rho}_{m}^{c} + \dot{\rho}^{s} \delta_{m1}, \quad (1)$$

where D is the diffusion coefficient,  $\rho_m$  is the mass density of the liquid phase,  $\rho$  is the total mass density,  $\dot{\rho}_m^c$  is the chemical source term;  $\dot{\rho}^s$ source term due to injection; u is the fluid velocity.

Equation of motion for a mixture of liquids is [15]:

$$\frac{\partial(\rho\vec{u})}{\partial t} + \vec{\nabla}(\rho\vec{u}\vec{u}) =$$

$$= -\frac{1}{a^{2}}\vec{\nabla}p \cdot A_{0}\vec{\nabla}(\frac{2}{3}\rho k) + \vec{\nabla}\vec{\sigma} + \vec{F}' + \rho\vec{g},$$
(2)

where p is the fluid pressure. In the equation,  $A_0$  is 0 for laminar flow and 1 when one of the turbulence models is used.

The internal energy equation is presented below [15]:

$$\frac{\partial(\rho\vec{I})}{\partial t} + \vec{\nabla}(\rho\vec{u}\vec{I}) = -\rho\vec{\nabla}\vec{u} + (1 - A_0)\vec{\sigma}\vec{\nabla}\vec{u} - \vec{\nabla}\vec{J} + A_0\rho\varepsilon + \dot{Q}^c + \dot{Q}^s,$$
(3)

where I is the specific internal energy,  $\hat{Q}^c$  is the source term due to the heat release as a result of a chemical reaction, and  $\dot{Q}^s$  is the heat brought by the injected fuel. The vector of heat change J is the sum of electrical conductivity and enthalpy transfer.

For technical applications, a more acceptable method is based on the solution of the averaged Navier-Stokes equations or Reynolds equations. In the approach of modeling the Reynolds-averaged Navier-Stokes equations (RANS), the ensemble averaging operation is applied to the basic equations, that is, all temporal and spatial scales of turbulence contribute to the dynamics of the averaged flow [16].

When calculating various characteristics of the flow, a system of equations of turbulent transfer was used, for the closure of which the standard turbulence  $k - \varepsilon$  model was used, since in studies related to the study of heat and mass transfer processes in turbulent flows of liquid fuels, this model exhibits stability, efficiency, and reasonable accuracy, which makes it most applicable for solving industrial problems [17-20]:

$$\rho \frac{\partial k}{\partial t} + \rho \frac{\partial \overline{u}_{j}k}{\partial x_{j}} = \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_{i}}{\sigma_{k}} \right) \frac{\partial k}{\partial x_{j}} \right] \frac{\partial \overline{u}_{i}}{\partial x_{j}} + G - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} \frac{\partial \overline{u}_{i}}{\partial x} - \rho \varepsilon \right], \quad (4)$$

$$\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \rho \frac{\partial \overline{u}_{j}\varepsilon}{\partial x_{j}} - \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_{i}}{\sigma_{\varepsilon}} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_{j}} \right] = c_{\varepsilon_{i}} \frac{\varepsilon}{k} - G - \left[ \left( \frac{2}{3} c_{\varepsilon_{i}} - c_{\varepsilon_{i}} \right) \rho \varepsilon \delta_{ij} \frac{\partial \overline{u}_{i}}{\partial x_{j}} \right] - c_{\varepsilon_{i}} \rho \frac{\varepsilon^{2}}{k}$$
(5)

The quantities  $C_{\varepsilon_1}$ ,  $C_{\varepsilon_2}$ ,  $C_{\varepsilon_3}$ ,  $\sigma_k$ ,  $\sigma_{\varepsilon}$  are model constants that are determined from the experiment.

This paper presents the results of the atomization of single-hole liquid fuel injection modeling depending on various external parameters. In this work to simulate the processes of single-hole injection of liquid fuel droplets the following parameters were used:

- the injection pressure  $P_i = 100$  and 150 bar;
- the initial fuel temperature  $T_f$  =363,15 K;

- the pressure in the combustion chamber  $P_c = 1,54$  bar;

- the temperature in the combustion chamber  $T_c = 306,15$  K;

- the duration of the injection time t=3,32 ms;

- total injection mass m=24.9 mg.

The operating fuel was isooctane.

Similar studies of the processes of spraying, dispersion and combustion of liquid fuel droplets in the combustion chamber were carried out in various works by the authors [21-25]. In these works, the optimal combustion modes of heptane, gasoline and tetradecane were determined depending on the initial temperature of the oxidizer, the injection mass and the droplet velocity in the combustion chamber. Therefore, all the initial conditions for modeling thermal processes were taken on the basis of data from previous works.

#### Numerical simulation results

By using a mathematical model the results of numerical modeling of the processes of spray, ignition and combustion of liquid fuel are presented depending on two initial pressures in the combustion chamber under high turbulence. The following figures show the simulation results of liquid fuel atomization in a model engine combustion chamber.

When liquid fuel is atomized into a stationary or moving gas, a two-phase reaction jet is formed, which burns to form a liquid fuel torch. As shown in Figure 3 an increase in pressure in the combustion chamber leads to an increase in the high temperature region. This behavior can be observed up to a pressure of 100 bar for isooctane. A further increase in the pressure in the combustion chamber leads to the fact that the region of high temperatures narrows and already at a pressure of 150 bar this region decreases (Figure 3, b).



a) P=100 bar b) P=150 bar

Figure 3 – Distribution of the maximum temperature in the space of the combustion chamber during the combustion of isooctane

Thus, analyzing this Figure 3, we can conclude that the optimal pressure for octane is 100 bar.

The following Figure 4 shows the dispersion of isooctane droplets along the radius and specific temperature of particles. Figure 4 shows the distribution of isooctane droplets in the combustion chamber depending on the radius and specific temperature of the particles. As can be seen, the droplet dispersion is dense, the droplets rise to 0.42 cm along the height of the combustion chamber (Figure 4, a). Consequently, the radius of the droplets at the height of the chamber was 7  $\mu$ m. Also, the specific temperature of each particle heated to high values was 363 K. The droplets rise to 0.42 cm along the height of the chamber (Figure 4, b).



a) radial distribution b) specific temperature distribution

**Figure 4** – Dispersion of isooctane droplets in terms of radius and specific temperature over the height of the combustion chamber at P=100 bar

Also during the computational experiments the aerodynamic and thermal characteristics of the spray and combustion of isooctane in the combustion chamber were obtained. Figure 5 shows the distribution of the transverse component of the droplet velocity in the combustion chamber. At the initial moment of time 1.2 ms in most of the volume of the chamber, the combustion rate of isooctane was 20 m/s, and on the axis of the chamber at the

moment t=2.5 ms, the velocity of isooctane droplets reached a maximum of 80 m/s.

The following Figure 6 shows the distribution of the longitudinal velocity component of isooctane droplets in the combustion chamber. As can be seen from the figure, the droplet velocity reaches its maximum 550 m/s on the camera axis. At the same time, in the rest of the combustion chamber, the fuel velocity remains constant at 50 m/s.



**Figure 5** – Distribution of the transverse component of the velocity of isooctane droplets at different times

Figure 7 shows the distribution of fuel concentration along the height of the combustion chamber. At the initial moment of time, when the fuel is ignited, droplets with a higher density are concentrated in the lower part of the chamber; over time, due to the processes of evaporation and collision, as well as due to high temperatures, they begin to rise upward towards the exit of the combustion chamber.



Figure 6 – Distribution of the longitudinal component of the velocity of isooctane droplets at different times

The region encompassing the maximum temperature is large, due to the evaporation and adhesion of isooctane droplets in the lower part of the chamber, although the liquid phase remains, the combustion of hydrocarbon liquid fuels occurs in the gas phase.



Figure 7 – Distribution of fuel concentration at different points in time

Figure 8 shows the intensity of heat transfer due to convection and heat conduction, which is described by the Nusselt criterion. As we know from the laws of heat transfer in a stationary medium, the Nusselt number is always greater than or equal to 1, since the heat flux due to convection always exceeds in magnitude the heat flux due to heat conduction. Since in our case the process is described at high turbulence, as we can see from the figure, a strong convective heat flux is observed on the chamber axis, which is a characteristic of a turbulent flow.

At the initial moment of time, when the fuel and the oxidizer mix intensively, the Nusselt criterion is of high value. Then, after a while, along the movement of heat to the outlet of the combustion chamber, the intensity of heat exchange fades away and the flow becomes stable.



t = 1.2 ms t = 2.5 ms

**Figure 8** – The intensity of convective heat transfer in the combustion chamber at different points in time

Also in the work, the results of numerical simulation of the processes of isooctane drops atomization were compared with the experimental data of some foreign authors [26]. The results of computational experiments on the change in the temporal distributions of the Sauter mean droplet diameter (SMD) of isooctane with distance from the injector are shown in the figures below.

Sauter mean diameter is the mean surfacevolumetric diameter of the droplets. The results obtained are compared with the experimental data presented in [26]. Here at various distances from the injector 10 mm, 20 mm, 30 mm, 40 mm, 50 mm and 60 mm for isooctane the experimental studies were conducted. We also did similar studies at the distance from the injector x=50 mm and 60 mm for isooctane. As can be seen from Figures 9-10, the experimental and simulation data are in good agreement. Analyzing the obtained data, which are presented in Figures 9-10, it can be assumed that the simulated and experimental data are in good agreement for liquid fuel.



Figure 9 – Comparison with the experiment of the temporal distributions of the Sauter mean droplet diameter (SMD) of isooctane at a distance of 50 mm from the injector: blue line – numerical simulation; dot – experiment

The analysis of the obtained results presented in this work indicates a good coincidence of the numerical results with the experimental data and allows us to conclude that the numerical model of liquid fuels spraying proposed in this work adequately describes real spraying processes and, consequently, the combustion process of liquid fuels of various types.



Figure 10 – Comparison with the experiment of the temporal distributions of the Sauter mean droplet diameter (SMD) of isooctane at a distance of 60 mm from the injector: blue line – numerical simulation; dot – experiment

#### Conclusion

This paper presents the results of modeling of single-hole fuel injection in internal combustion engines. Here, the liquid is injected in the form of droplets, which are assumed to have an average size comparable to the diameter of the nozzle outlet.

The paper presents the results of computational experiments to determine the optimal conditions for the combustion of liquid fuel (isooctane). The results obtained were compared with experimental data. There were conducted the processes of atomization and combustion of liquid fuel depending on various initial conditions. The influence of pressure in the combustion chamber on the processes of spray and dispersion of droplets at high turbulence were obtained. The optimal combustion parameters for isooctane are determined.

#### Acknowledgements

This work was supported by the Ministry of Education and Science of the Republic of Kazakhstan (No. AP08857288).

#### References

1 Beketayeva M., Gabitova Z., Bekmukhamet A., Bolegenova S. Control of harmful emissions concentration into the atmosphere of megacities of Kazakhstan Republic //Proc. of International conf. on Future Information Engineering. – Beijing, 2014. – Vol.10. – P. 252-258.

2 Bolegenova S., Beketayeva M., Leithner R., Ergalieva A., Nugymanova A. Computational modeling of heat and mass transfer processes in combustion chamber at power plant of Kazakhstan //Proc. of MATEC Web of Conferences. – 2016. – Vol. 76. – P. 5.

3 Askarova A., Bolegenova S., Georgiev A., Nugymanova A., Baizhuma Zh. The use of a new "clean" technology for burning low-grade coal in on boilers of Kazakhstan TPPs //Bulgarian Chemical Communications. – 2018. – Vol. 50. – P. 53-60.

4 Messerle V., Askarova A., Ustimenko A. Reduction of noxious substance emissions at the pulverized fuel combustion in the combustor of the BKZ-160 boiler of the Almaty heat electro power station using the "Overfire Air" technology //Thermophysics and Aeromechanics. – 2016. – Vol. 231. – P. 125-134.

5 Renard L. The automobile manufacturers' global competitiveness and dimension effects: Differentiation and cost advantages reconciled //International Journal of Automotive Technology and Management. – 2002. – Vol. 2, №3 (4). – P. 280-288.

6 Национальный доклад о состоянии окружающей среды и использовании природных ресурсов Республики Казахстан за 2019 год //Республиканская специализированная газета «Экология Казахстана». – 2020. – №9(056). – С. 8.

7 Befrui B., Corbinelli G., D'Onofrio M., Varble D. GDI multi-hole injector internal flow and spray analysis // SAE Technical Paper. - 2011. - Vol. 8, iss.1. - P. 1-11.

8 Prosperi B., Helie J., Bazile R. PIV measurements of injection pressure effect on gas entrainment in GDI engines / 21st Annual Conf. on Liquid Atomization and Spray Systems. – Mugla, 2007. – P. 1115-1121.

9 Wood A., Wigley G., Helie J. Analysis of Multi-hole GDI Injectors under Flash Boiling Conditions //17<sup>th</sup> Intern. Symposium on Applications of Laser Techniques to Fluid Mechanics. – Lisbon, 2014. – P. 1-10.

10 Mojtabi M., Chadwick N., Wigley G., Helie J. The effect of flash boiling on breakup and atomisation in GDI sprays //Proc. of the 22<sup>nd</sup> European Conf. on Liquid Atomization and Spray Systems. – Como Lake, 2008. – P. 1-9.

11 Wigley G., Mojtabi M., Williams M., Pitcher G, Nuglisch H. The Effect of Fuel Properties on Liquid Breakup and Atomization in GDI Sprays //10th Intern. Congress on Liquid Atomization and Spray Systems (ICLASS, 2006). – Kyoto, 2006. – Vol. 6. – P. 53-62.

12 Zeng W., Xu M., Zhang G., Zhang Y., Cleary D.J. Atomization and vaporization for flash-boiling multi-hole sprays with alcohol fuels //Fuel. - 2012. - Vol.95. - P. 287-297.

13 Askarova A., Ospanova Sh., et.al. 3D modelling of heat and mass transfer processes during the combustion of liquid fuel //Bulgarian Chemical Communications. – 2016. – Vol. 48. – P. 229-235.

14 Gorokhovski M. The stochastic Lagrangian model of drop breakup in the computation of liquid sprays //Atomization and Sprays. - 2001. - Vol. 1. - P. 169-176.

15 Amsden D.C., Amsden A.A. The KIVA Story: A Paradigm of Technology Transfer //IEEE Transactions on Professional Communication Journal. – 1993. – Vol. 36, №4. – P. 190-195.

16 Bolegenova S., Ospanova Sh., et.al. Investigation of various types of liquid fuel atomization and combustion processes at high turbulence //Journal of engineering and applied sciences. -2018. -Vol. 13. -P. 4054-4064.

17 P. Safarik, V. Maximov Investigation of heat and mass transfer processes in the combustion chamber of industrial power plant boiler. Part 2. Distribution of concentrations of O<sub>2</sub>, CO, CO<sub>2</sub>, NO //Journal of Applied and Computational Mechanics. – 2018. – Vol. 12. – P. 127-138.

18 Askarova A., Bolegenova S., Beketayeva M. Modeling of heat mass transfer in high-temperature reacting flows with combustion //High Temperature. - 2018. - Vol. 56. - P. 738-743.

19 Askarova A., Safarik P., Nugymanova A., Bolegenova S. Minimization of toxic emissions during burning low-grade fuel at Kazakhstan thermal power plant //Acta Polytechnica. – 2020. – Vol. 60(3). – P. 206-213.

20 Ospanova Sh., Maximov V., Bolegenova S., Beketayeva M. The computational study of heat and mass transfer processes at combustion of pulverized kazakh coal in real conditions of energy objects //J. Bulgarian Chemical Communications. – 2018. – Vol. 50. – P. 61-67.

21 Askarova A., et al. Investigation of the different Reynolds numbers influence on the atomization and combustion processes of liquid fuel //Bulgarian Chemical Communications. -2018. - Vol. 50. - P. 68-77.

22 Ospanova Sh., Berezovskaya I., et.al. Numerical simulation of the oxidant's temperature and influence on the liquid fuel combustion processes at high pressures //Journal of Engineering and Applied Sciences. – 2015. – Vol.10. – P. 90-95.

23 Beketayeva M.T., Bolegenova S.A., et al. Influence of boundary conditions to heat and mass transfer processes // International Journal of Mechanics. -2016. - Vol. 10. - P. 320-325.

24 Mazhrenova N., Ospanova Sh., et.al. 3D modelling of heat and mass transfer processes during the combustion of liquid fuel //Bulgarian Chemical Communications. – 2016. – Vol. 48. – P. 229-235.

25 Ospanova Sh., Bolegenova S., et.al. 3D modeling of heat and mass transfer during combustion of solid fuel in BKZ-420-140-7c combustion chamber of Kazakhstan //Journal of Applied Fluid Mechanics. – 2016. – Vol. 9. – P. 699-709.

26 Arcoumanis C., Gavaises M. Linking nozzle flow with spray characteristics in a diesel fuel injection systems //Atomization and Sprays. - 1998. - Vol. 8. - P. 307-347.

#### References

1 M. Beketayeva et.al. Proc. Int. Conf. Future Inform. Engin. (Beijing, China, 2014), p.252-258.

2 S. Bolegenova et.al. Proc. of MATEC Web of Conf. (2016), p.5.

3 A. Askarova, S. Bolegenova, A. Georgiev, A. Nugymanova and Zh. Baizhuma, J. Bulg. Chem. Commun., 50, 53-60 (2018).

4 V. Messerle, A. Askarova and A. Ustimenko Thermoph.&Aeromech., 231, 125-134 (2016).

5 L. Renard Int. J. Aut. Techn.&Managm., 2 (3), 280-288 (2002).

6 Republican specialized newspaper "Ecology of Kazakhstan", 9(056), 8 (2020). (in Russ)

7 B. Befrui, G. Corbinelli, D'Onofrio M. and Varble D. SAE Tech. Paper, 8 (1), 1-11 (2011).

8 B. Prosperi, et.al. Proc. 21st An. Conf. Liq. Atom.&Spray Syst. (Mugla, Turkey, 2007), p.1115-1121.

9 A. Wood, et.al. Pros. 17th Int. Symp. Appl. Laser Tech. Fluid Mech. (Lisbon, Portugal, 2014), p.1-10.

10 M. Mojtabi, et.al. Proc. 22<sup>nd</sup> Europ. Conf. Liquid Atom.&Spray Syst. (Como Lake, 2008), p.1-9.

11 G. Wigley, et.al. Proc. 10th Int. Cong. Liquid Atom. & Spray Syst. (ICLASS, 2006) (Kyoto, Japan, 2006), p.53-62.

12 W. Zeng, M. Xu, G. Zhang and Y. Zhang Fuel, 95, 287-297 (2012).

13 A. Askarova, et.al., J. Bulg. Chem. Commun., 48, 229-235 (2016).

14 M. Gorokhovski. Atom.&Sprays, 1, 169-176, (2001).

15 Amsden D.C., Amsden A.A. IEEE Trans. Prof. Commun. J., 36(4), 490-195 (1993).

16 Bolegenova S, et.al. J. Eng. Appl. Sc., 13, 4054-4064 (2018).

17 P. Safarik, V. Maximov J. Appl. Comp. Mech., 12, 127-138 (2018).

18 A. Askarova, et.al. High Temp., 56, 738-743 (2018).

19 A. Askarova, et.al. Acta Polytech., 60(3), 206-213 (2020).

20 Sh. Ospanova, et.al. J. Bulg. Chem. Commun., 50, 61-67 (2018).

21 A. Askarova, et al. J. Bulg. Chem. Commun., 50, 68-77 (2018).

22 Sh. Ospanova, et.al. J. Eng. Appl. Sc., 10, 90-95 (2015).

23 M.T. Beketayeva, et al. Int. J. Mech., 10, 320-325 (2016).

24 N. Mazhrenova, et.al. J. Bulg. Chem. Commun., 48, 229-235 (2016).

25 Sh. Ospanova, et.al. J. Appl. Fluid Mech., 9, 699-709 (2016).

26 C. Arcoumanis, M. Gavaises. Atom.&Sprays, 8, 307-347 (1998).

МРНТИ 28.17.23

## https://doi.org/10.26577/RCPh.2020.v75.i4.08

### Е.И. Карпенко<sup>1</sup>, А.Б. Устименко<sup>2\*</sup>

<sup>1</sup>Отраслевой Центр Плазменно-Энергетических Технологий РАО «ЕЭС России», Россия, г. Гусиноозерск <sup>2</sup>ТОО «Плазмотехника», Казахстан, г. Алматы \*e-mail: ust@physics.kz

# ПЛАЗМЕННЫЕ МЕТОДЫ ПОВЫШЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ТВЕРДЫХ ТОПЛИВ

После нефти уголь вносит наибольший вклад в мировой баланс производства первичных энергетических ресурсов. Так, со времен первого нефтяного кризиса мировое потребление угля увеличилось на 45%, и достигло доли в 22% в общем производстве первичных энергоресурсов (ОПЭР). Уголь более всего используется при производстве электроэнергии: около 40% производимой в мире электроэнергии вырабатывается путем сжигания угля. В статье рассмотрена одна из перспективных технологий – плазменное зажигание и сжигание энергетических углей, применение которой позволяет заменять дорогую нефть дешевым углем на всех тепловых электростанциях. Плазменная технология пуска безмасляных котлов и стабилизации пламени угольной пыли апробирована на ТЭЦ Российской Федерации, Республики Казахстана, Украины, Китая, Монголии, Кореи, Словакии и Сербии. В статье обоснована необходимость развития новых технологий утилизации топлива. Описаны теоретические и экспериментальные методы исследования воспламенения угольной плазмы, термохимической подготовки, сжигания и газификации. В стаьтье обсуждаются методы расчета плазменно-топливных систем. Приведены основные принципы функционирования плазменно-топливных систем и рассмотерны вопросы обеспечения эко-экономических преимуществ по сравнению с традиционными технологиями использования топлива.

Ключевые слова: плазменная технология, плазменное зажигание, сжигание энергетических углей, методы плазменно-топливных систем.

E.I. Karpenko<sup>1</sup>, A.B. Ustimenko<sup>2\*</sup> <sup>1</sup>Branch Centre of Plasma- Energy Technologies of the RJSC "EES of Russia", Russia, Gusinoozersk <sup>2</sup>«Plasmotechnika LLP», Kazakhstan, Almaty \*e-mail: ust@physics.kz

#### Plasma methods for efficiency of solid fuel utilization improvement

After oil, coal makes the largest contribution to the global balance of primary energy production. Thus, since the first oil crisis, global coal consumption has increased by 45%, and reached a share of 22% in the total production of primary energy resources (PPER). Coal is most used in power generation: about 40% of the world's electricity is generated by burning coal. Necessity of fuel utilization new technologies development is justified. One of the promising technologies is plasma ignition and incineration of power coals, application of which allows substitution of expensive oil by cheap coal in thermal power plants. Plasma technology of oil-free boilers start up and pulverized coal flame stabilization has been tested in thermal power plant of Russia, Republic of Kazakhstan, Ukraine, China, Mongolia, Korea, Slovakia and Serbia. Theoretical and experimental methods of investigation of coal plasma ignition, thermochemical preparation, incineration and gasification are described. Methods of plasma-fuel systems computation are discussed. Ensuring eco-economical advantages in compare with conventional technologies of fuel utilization basic principles of plasma-fuel systems functioning are presented.

**Kew words**: plasma technology, plasma ignition, incineration of power coals, methods of plasmafuel systems.

#### Е.И. Карпенко<sup>1</sup>, А.Б. Устименко<sup>2\*</sup>

<sup>1</sup>«Ресейдің ЕЭС» РАО плазма-энергетикалық технологиялар орталығы, Ресей, Гусинозерск қ. <sup>2</sup>«Плазмотехника» ЖШС, Қазақстан, Алматы қ. \*e-mail: ust@physics.kz

#### Қатты отынды пайдалану тиімділігін арттырудың плазмалық әдістері

Мұнайдан кейін көмір алғашқы энергия өндірісінің әлемдік балансына үлкен үлес қосады. Осылайша, алғашқы мұнай дағдарысынан бастап көмірді әлемдік тұтыну 45% -ға өсті және
алғашқы энергетикалық ресурстардың (АЭРӨ) жалпы өндірісіндегі 22% үлеске жетті. Көмір электр энергиясын өндіруде көбірек қолданылады: әлемдегі электр энергиясының шамамен 40% көмірді жағу арқылы өндіріледі. Бұл мақалада отынды кәдеге жаратудың жаңа технологияларын жасау қажеттілігі дәлелденді. Перспективалы технологиялардың бірі плазмалық от жағу және термалды көмірді жағу болып табылатыны белгілі, оны пайдалану жылу электр станцияларында қымбат мұнайды арзан көмірге ауыстыруға мүмкіндік береді. Мұнайсыз қазандықтарды іске қосудың және көмір шаңының жалынын тұрақтандырудың плазмалық технологиясы Ресей Федерациясы, Қазақстан Республикасы, Украина, Қытай, Моңғолия, Корея, Словакия және Сербия жылу энергетикалық стансиялардында сынақтан өтті. Көмір плазмасының тұтануын, термохимиялық дайындалуын, жануын және газдануын зерттеудің теориялық және тәжірибелік әдістері сипатталған. Плазмалық отын жүйелерін есептеу әдістері талқыланады. Мақалада отынды пайдаланудың дәстүрлі технологияларымен салыстырғанда экологиялық – экономикалық артықшылықтар беру плазмалық отын жүйелерінің жұмыс істеуінің негізгі принциптері көрсетілген.

**Түйін сөздер**: плазмалық технология, плазмалық тұтану, энергия өндіретін көмірлердің жануы, плазмалық-отындық жүйелердің әдістері.

#### Введение

Поскольку уголь является одним из главных источников энергии XXI века проблеме его эффективного и экологически чистого сжигания во всем мире уделяется большое внимание. Доля угля в запасах ископаемых топлив показана на рис. 1. По сравнению с другими ископаемыми топливами, запасы угля приблизительно в четыре раза превышают запасы нефти (оценочно на 41 год) или запасов газа (на 67 лет) [1].

Мировая энергетика в настоящее время и на обозримую перспективу ориентирована на использование органического топлива, главным образом низкосортных углей. Следует отметить, что ухудшение качества энергетических углей наблюдается повсеместно, и не только в странах СНГ, но и в развитых капиталистических странах. Несмотря на то, что за всю историю были подъемы и падения в активности использования угля он и сейчас остается одним из важнейших топлив для выработки энергии, особенно электрической (рис. 2). Согласно статистике 2011 года [3] углем обеспечивается около 24% выработки тепловой энергии и около 40.6 % электрической энергии в мире. При этом в ближайшем будущем ожидается рост его использования. По прогнозам [4] к 2020 году доля угля в мировом топливном балансе превысит 50 %.



1 – нефть, 2 – газ, 3 – уголь



 1 – уголь, 2 –жидкое топливо (мазут, соляра), 3 – газ, 4 – атомная энергия, 5 – гидроэнергия, 6 – другие (солнечная, ветровая, геотермальная энергия, отходы, включая растительного происхождения)

Рисунок 2 – Распределение энергоносителей по производству электроэнергии в мире [3]

Рисунок 1 – Мировые разведанные запасы ископаемых топлив [2]

Рисунок 3 показывает долю первичных энергоносителей в прошлом и будущем. Данные исследования основаны на прогнозе доступности и роста потребности в энергии [5, 6]. Из рисунка следует, что доля нефти и газа в выработке энергии к 2100 г. будет снижаться, а доля угля – возрастать.



Рисунок 3 – Доля первичных энергоносителей в период с 1850 по 2100 годы

Непосредственное сжигание низкосортных углей, обладающих высокой зольностью (40-50%), влажностью (30-40 %), серосодержанием (1-3%) и низким выходом летучих (5-15%), в существующих топочных устройствах связано со значительными трудностями из-за ухудшения воспламенения и выгорания топлива, увеличения мехнедожога и вредных пылегазовых выбросов (парниковых газов, золы, оксидов азота и серы). Достаточно сказать, что проблема выбросов парниковых газов (двуокиси углерода, метана и др.) и вызванное этим общее потепление переросла в настоящее время в общечеловеческую проблему, связанную с глобальным изменением климата на земле, затоплением огромных территорий суши, опустыниванием и др.

Кроме того, для современного развития мировой теплоэнергетики характерно сокращение использования дефицитного жидкого топлива, являющегося ценным сырьем для нефтеперерабатывающей промышленности, и расширение применения твердых топлив, качество которых неуклонно снижается. В мировой практике принято обогащать угли перед их сжиганием. Однако нельзя ожидать обогащения углей в объемах, необходимых для ТЭС России и стран СНГ, особенно из-за большой стоимости обогащения. Кроме того, в результате обогащения можно снизить зольность и влажность углей, тогда как увеличить реакционную способность, т.е. выход летучих (тощие угли, антрацит имеют выход летучих 4-12%), путем обогащения невозможно. Для улучшения воспламенения и стабилизации горения низкосортных углей с низким выходом летучих и высокой зольностью [7] существуют дополнительные мероприятия, которые в основном сводятся к утонению помола (до  $R_{90}$ =6-8%), подогреву аэросмеси (до 150°С) и вторичного воздуха (до 400°С), подаче угольной пыли высокой концентрации (до 50 кг/кг) с последующим разбавлением и, наконец, совместному сжиганию с углем мазута или природного газа. Последнее техническое решение получило самое широкое распространение.

В мире на растопку пылеугольных котлов из холодного или горячего состояния, подхват и стабилизацию горения пылеугольного факела расходуют более 50 млн. тонн мазута и дизтоплива в год. На ТЭС растопка котлов (время растопки 3-14 часов) производится несколько раз в год (до 25 и более пусков ежегодно на один котел), а подсветка пылеугольного факела осуществляется периодически при потускнении факела или снижении нагрузки. Для котлов различной паропроизводительности в соответствии с «Инструкцией по их эксплуатации» расходуется разное количество мазута (таблица 1).

Таблица 1 – Расход мазута на растопку котлов различной паропроизводительности

Паропроизводительность котла, т/ч	Расход мазута на 1 растопку, т
50-75	3 - 6
160-200	10-25
2 2 0 - 4 2 0	30-80
640-670	80-100
950	100-140
1650	150-250
2650	250-350

Однако, существующая в теплоэнергетике практика использования для растопки котлов и стабилизации горения низкосортных углей, дефицитных мазута и природного газа не решает проблемы, так как их совместное сжигание с углем приводит к повышению мехнедожога и выбросов оксидов азота и серы (в случае стабилизации горения пылеугольного факела высокосернистым мазутом). Использование для растопки котлов и подсветки пылеугольного топлива огромного количества мазута является одной из причин снижения эффективности топливоиспользования и низких экологических показателей работы тепловых электростанций. Резкое ужесточение в последнее время требований к повышению эффективности топливоиспользования и защите окружающей среды от вредных выбросов явилось мощным стимулом для развития новых перспективных технологий подготовки к сжиганию и комплексной переработки топлив, позволяющих решить вышеуказанные проблемы.

#### Плазменные методы термохимической переработки твердых топлив

Среди технических решений, предлагаемых для осуществления предварительной подготовки к сжиганию и комплексной переработки углей, наиболее прогрессивными представляются плазменные методы термохимической переработки твердых топлив. Эти методы основаны на использовании для нагрева и термохимических превращений органической и минеральной части углей электроэнергии, преобразуемой в энергию плазмы в электродуговых плазмотронах.

Широкое распространение в народном хозяйстве высокоэффективной плазменной технологии (в химии, металлургии, машиностроении, обрабатывающей промышленности и др.) предопределило ее использование для вышеназванных задач энергетики. Применение для плазменной термохимической подготовки и переработки топлив электродуговой плазмы с высокой концентрацией энергии, на 1-2 порядка превышающей таковую в существующих огневых устройствах, наличие в ней химически активных центров (атомов, свободных радикалов, ионов и электронного газа), практически отсутствующих в обычных топочных процессах, способствует энергетически кинетически более эффективному, чем в традиционных огневых методах, осуществлению нагрева и термохимических превращений углей. Наиболее разработаны две формы использования электроэнергии: в форме энергии низкотемпературной плазмы [8, 9] для воспламенения пылеугольного факела и в виде джоулевого тепла при прохождении электрического тока через углеродосодержащий материал (электрокипящий слой) [10] или через омическое сопротивление (электрозапальник резисторного типа) [11, 12]. Были разработаны различные конструкции растопочных пылеугольных горелок как у нас в стране, так и за рубежом. Преобразование электроэнергии в энергию электродугового разряда позволяет более активно воздействовать на процессы воспламенения и стабилизации горения твердых топлив. У истоков этого направления в энергетике стояли исследователи Blackburn P.R., Reason I. (Англия) [13, 14], Cioffi P.L. (США) [15], Tuppeny W.H. (США) [16], Drouet M.G., Duverger D., Ashard I.L. (Канада) [8, 17].

Исследования в этой области проводятся в ряде научных коллективов России и стран СНГ - в Отраслевом центре плазменно-энергетических технологий РАО «ЕЭС России», Институте теплофизики СО РАН, Институте нефтехимического синтеза РАН, ОАО «ЭНИН им. Г.М. Кржижановского», ОАО «Всероссийский теплотехнический институт», Институте угольных энерготехнологий НАН Украины, Институте физики НАН Киргизии, ОАО КазНИИ энергетики им. Академика Ш.Ч. Чокина, НИИ экспериментальной и теоретической физики Казахского Национального Университета им. аль-Фараби МОН РК, Институте проблем горения МОН РК, ТОО «НТО Плазмотехника» в Казахстане и др. В дальнем зарубежье исследования плазменного воспламенения и стабилизации горения пылеугольного факела осуществляют известные энергетические фирмы США, Канады, ФРГ, Китая, Кореи, Турции (Бабкок Уилкокс, Комбашн Инжиниринг, Вестингауз, Сидбек Норминс, Штайнмюллер, Фостер Уиллер, Лоеше, Янтай Луньян, Нанкинская электротехническая компания, Электроэнергетическая компания ХАНА, Турецкий Национальный плазменный центр, и др.), которые уже имеют и опыт промышленной эксплуатации электродуговых плазмотронов на ряде электростанций Китая, Кореи, США и Канады [8, 18, 19].

Традиционные технологии сжигания твердых топлив приводят к более высокому уровню выброса вредных веществ, чем при сжигании жидкого и газообразного топлива. Рост доли твердых топлив в энергобалансе ТЭС требует создания новых более эффективных и экологически чистых технологий их использования. В частности, существующая в теплоэнергетике практика совместного сжигания мазута с углем ухудшает основные показатели пылеугольных тепловых электростанций.

Для повышения эффективности использования твердых топлив, снижения доли мазута и природного газа в топливном балансе тепловых электростанций и снижения вредных пылегазовых выбросов была разработана плазменная технология воспламенения, термохимической подготовки и сжигания углей [20 – 29].

В 1980 году по инициативе Госкомитета по науке и технике СССР Госплан СССР утвердил программу ОЦ.008 «Плазмохимическая переработка углей и шламов гидрогенизации углей» для решения проблемы эффективной и экологически приемлемой утилизации низкосортных твердых топлив. Головными организациями по разработке технологии и плазменного оборудования были определены Институт нефтехимического синтеза АН СССР, КазНИИ Энергетики Минэнерго СССР и Институт Теплофизики СО АН СССР. По результатам этой программы в 1986 году была разработана отраслевая научнотехническая программа Минэнерго СССР ОНТП 00.00.01. «Повышение эффективности использования низкосортных топлив на тепловых электростанциях». Головными организациями были назначены Всесоюзный теплотехнический институт и КазНИИ Энергетики Минэнерго СССР [19].

Разработанная технология и плазменнотопливные системы для ее осуществления были успешно испытаны в 1989 году на Усть-Каменогорской ТЭЦ (Казахстан) и на Мироновской ГРЭС (Украина), в 1995 году на Баодийской ТЭС (Китай) и в 1996 на Алматинской ТЭЦ-3 (Казахстан) [20]. В 1995г. работы по дальнейшему развитию и внедрению ПТС получили мощный импульс в России (г. Гусиноозерск), где для этих целей был создан Отраслевой Центр Плазменно-Энергетических технологий РАО «ЕЭС России» [24]. С 1998 года по настоящее время совершенствование плазменных технологий переработки твердых топлив продолжается в рамках совместных проектов Казахстана и России представителями отраслевой, академической и вузовской науки.

За этот период разработано и испытано на ТЭС три поколения плазменно-топливных систем (ПТС) (таблица 2). Из таблицы видно, что ПТС установлены и испытаны в России, Казахстане, Украине, Корее, Китае, Словакии и Монголии на 31 котле паропроизводительностью от 75 до 950 т/ч, оснащенных различными системами пылеприготовления (прямого вдувания и с промежуточным бункером) и разными типами пылеугольных горелок (прямоточные, муфельные и вихревые). При испытаниях ПТС сжигались все типы энергетических углей (бурые, каменные, антрациты и их смеси) с содержанием летучих от 4 до 50%, зольностью от 15 до 56% и теплотой сгорания от 1600 до 6200 ккал/кг.

В ПТС первого поколения использовался плазмотрон с подаваемым стержневым графитовым катодом и кольцевым медным водоохлаждаемым анодом. ПТС первого поколения были внедрены на котле Ч-200 Баодийской ТЭС. Компания Yantai Longyuan Electric Power Technolоду Со., Ltd (Китай), модернизировав эти ПТС первого поколения, распространила их еще на 500 котлах Китая с установленной мощностью более 300 млн. кВт [30, 31]. В ПТС второго поколения (1996-2001) использовались плазмотроны уже со сменными медными водоохлаждаемыми катодом и анодом. Источники электропитания обеспечивали устойчивую параллельную работу одновременно нескольких плазмотронов от одного трансформатора. При испытаниях ПТС второго поколения на Шаогуанской ТЭС (Китай) в 1999-2001 г.г. от одного трансформатора работало 8 ПТС. В 2007 году на котле BG-75/39-М ТЭС «Золотая Гора» в г. Шеньян и в 2009 г. на ТЭС «Ганшун» в г. Шанси (Китай) испытаны ПТС третьего поколения [19]. В отличие от предыдущих поколений ПТС был обеспечен безосцилляторный пуск и безбалластный режим работы плазмотронов. Мощность плазмотрона может варьироваться в широком интервале от 80 до 300 кВт [32].

Последний пример реализации ПТС третьего поколения на Алматинской ТЭЦ-2 (табл. 2) представлен на рис. 4 [33]. Во время испытаний температура факелов от ПТС составляла 1050-1070°С (фото на рис.4). Зафиксировано, что скорость повышения температуры горячего воздуха в режиме растопки котла из холодного состояния соответствовала скорости повышения температуры при мазутной растопке котлоагрегата.

При использовании ПТС мазут, дизельное топливо или природный газ заменяют самой угольной пылью, подвергаемой термохимической подготовке в объеме пылеугольной горелки с использованием электродуговых плазмотронов, являющихся основным элементом ПТС. Texнология ПТС основана на плазменной термохимической подготовке угля к сжиганию. Она заключается в нагреве аэросмеси (угольная пыль + воздух) электродуговой плазмой до температуры выхода летучих угля и частичной газификации коксового остатка. Тем самым из исходного угля независимо от его качества из аэросмеси получают высокореакционное двухкомпонентное топливо (горючий газ + коксовый остаток). При его смешении с вторичным воздухом в топке котла двухкомпонентное топливо воспламеняется и устойчиво горит без использования дополнительного топлива (мазут или природный газ), традиционно используемого для растопки котлов из холодного состояния и стабилизации горения факела низкосортного энергетического угля.

N⁰	Месторасположение ТЭС	Тип и количество котлов с ПТС	Паропроизводи-тель- ность котла, т/ч	Кол-во ПТС, шт.
		Российская Федерация		I
1.	Гусиноозерская ГРЭС (г.Гусиноозерск, 1994-1995)	ТПЕ-215 – 2 котла БКЗ-640 – 2 котла	670 640	8 7
2.	Черепетская ГРЭС (г. Суворов, 1997)	ТП-240 – 1 котел	240	4
3.	Нерюнгринская ГРЭС (г. Нерюнгри, 1997)	КВТК-100 – 1 котел	116 МВт	2
4.	Партизанская ГРЭС (г. Партизанск, 1998)	TП-170 – 1 котел	170	2
5.	Улан-Удэнская ТЭЦ-2 (г. Улан-Удэ, 1997)	ТПЕ-185 — 1 котел	160	2
6.	Хабаровская ТЭЦ-3 (г. Хабаровск, 1998)	ТПЕ-216 – 1 котел	670	4
		Украина		
7.	Кураховская ТЭС (г. Курахово, 1998-1999)	ТП-109 – 1 котел	670	4
8.	Мироновская ГРЭС (г. Мироновка, 1989)	TП-230 – 1 котел	230	2
		Казахстан		
9.	Алматинская ГРЭС (г. Алма-Ата, 1996)	БКЗ-160 – 1 котел	160	2
10.	Усть-Каменогорская ТЭЦ (г.Усть-Каменогорск, 1989)	ЦКТИ-75 – 2 котла	75	4
11.	Алматинская ТЭЦ-2 (г. Алматы, 2011)	БКЗ-420 – 1 котел	420	6
		Монголия		
12.	Улан-Баторская ТЭЦ-4 (г. Улан-Батор, 1994)	БКЗ-420 – 8 котлов	420	16
13.	Эрдэнэтская ТЭЦ (г. Эрдэнэт, 1995)	БКЗ-75 – 1 котел	75	1
		Китай		
14.	Баодийская ТЭС (г. Баоди, 1995)	Ч-200 – 1 котел	200	3
15.	Шаогуанская ТЭС (г. Шаогуан, 1999-2001)	F-220/100-W – 1 котел K-75 – 1 котел	230 75	4 1
16.	ТЭС «Золотая Гора» (г. Шеньян, 2007)	BG-75/39-М – 1 котел	75	2
17.	ТЭС «Ганшун» (г. Шанси, 2009)	BG-950/150 – 1 котел	950	4
Северная Корея				
18.	Восточно-Пхеньянская ТЭС (г. Пхе- ньян, 1993)	Е-210 – 1 котел	210	3
Словакия				
19.	ТЭС «Вояны» (г. Велки-Капушаны, 2000)	TAVICI – 1 котел	350	2
Сербия				
20.	Белградская ТЭС «Никола Тесла» (г. Обреновац, 2007)	ТП-210 – 1 котел	650	16

## Таблица 2 – Промышленные испытания ПТС на ТЭС Евразии



1 – штатная вихревая двухпоточная пылеугольная горелка, 2 – ПТС

Рисунок 4 – ПТС и схема их компоновки на котле БКЗ-420 АТЭЦ-2

Эта технология весьма актуальна для применения не только на пылеугольных ТЭС, но и в других базовых отраслях (цементная и химическая промышленность, металлургия, стройиндустрия), использующих твердое топливо и продукты его переработки.

Перспективной технологией для замещения кокса, жидкого топлива и природного газа в вышеназванных отраслях промышленности является плазменная газификация низкосортных твердых топлив с получением высококалорийного синтез-газа.

Реализация новых плазменных термохимических технологий подготовки к сжиганию и комплексной переработки твердых топлив обеспечивается, в конечном счете, уровнем разработки методов расчета исследуемых процессов и плазменных устройств для их осуществления. Последние тесно связаны с расчетно-теоретическими и экспериментальными исследованиями теплофизических процессов движения и нагрева угольных частиц и термохимических процессов их последующих превращений в электродуговых устройствах. Крайняя сложность и взаимообусловленность рассматриваемых процессов, характеризующаяся наличием газовой, твердой и жидкой фаз и многокомпонентностью во всех фазовых состояниях, приводит к необходимости математического моделирования указанного комплекса процессов с определением теплофизических констант расчетно-теоретическими и эмпирическими методами с помощью компьютеров и специально созданных экспериментальных установок.

Работы по повышению эффективности использования твердых топлив с использованием плазменных технологий выполнялись в соответствии с программами и заданиями: Отраслевая научно-техническая программа Минэнерго СССР ОНТП 00.00.01, 1986-1990 г.г.; Задание

РАО «ЕЭС России» 03.00 (шифр СИ 8205), тема - Создание опытно-промышленной системы безмазутного растопки и подсветки пылеугольного факела с помощью электродуговых плазмотронов, 1992-1995 г.г.; Программа РАО «ЕЭС России» «Разработка новых технологий использования низкосортного твердого топлива в отрасли «Электроэнергетика»», 1993 г.; Протокол Научно-технического совета РАО «ЕЭС России» от 19.05.97 г. по теме: «Система безопасной растопки и подсветки пылеугольных котлов с использованием плазмотронов»; Приказ РАО «ЕЭС России» «О мерах по повышению надежности работы и технического уровня производства», 2002 г.; а также работа выполнялась в рамках Международных проектов (Grant "Copernicus", INCO : International Scientific Cooperation Projects (1998-2002), № IC-CT-98-0516 "Plasma Gasification of the Power Coals"; Grant "Copernicus", INCO 2: International Scientific Cooperation Projects 2 (2001-2004), № ICA2-CT-2001-10006, "Improvement of Coal Combustion Efficiency and Decrease of Harmful Emission under the Influence of Plasma - ICEDHE"; Грант ISTC К-746, (2002-2006) "Plasma Technologies of Solid Fuels Processing for Power Engineering and Metallurgy").

Однако дальнейшее развитие плазменноэнергетических технологий в немалой степени сдерживается из-за отсутствия адекватных математических моделей, позволяющих рассчитывать с необходимой точностью процессы, происходящие внутри ПТС.

В отличие от традиционных способов термохимической подготовки топлива (ТХПТ) к сжиганию плазменной технологии присущи определенные особенности [25, 34]:

истечение плазменной струи в поток происходит со скоростью ~200 м/сек при огромном градиенте температур между струей и потоком, т.е. интенсивность турбулентного переноса тепла в поток аэросмеси (смеси угольной пыли с воздухом) очень высока, что способствует ее быстрому прогреву и воспламенению;

экспериментально установлено, что угольные частицы при взаимодействии с высокотемпературной плазменной струей при скорости нагрева 10<sup>3</sup>-10<sup>4</sup> град/с подвергаются тепловому удару и из-за термических напряжений раскалываются на десятки фрагментов, что приводит к резкому увеличению поверхности реагирования и соответственному росту скорости выделения тепла при горении, т.е. ускорению ТХПТ [35]. Кроме того, при плазменной ТХПТ в качестве топлива для нагрева аэросмеси используется часть угольной пыли, являющейся основным топливом. Это существенно упрощает технологический процесс в целом.

#### Преимущества использования ПТС

Рассматривая вышеприведенные факторы совместно с инженерно-технологическими решениями, можно выделить основные преимущества использования ПТС по сравнению с традиционными решениями:

технологичность ТХПТ с использованием ПТС. С точки зрения технологичности мазутная ТХПТ более сложна: она с неизбежностью требует наличия мазутного хозяйства с общеизвестными, присущими ему проблемами. При мазутной ТХПТ появление дополнительных звеньев в цепи воспламенения делает более неопределенной возможность ее применения в режиме подхвата факела. В то же время, в силу практически безинерционного запуска плазмотрона, нет препятствий к использованию плазменной ТХПТ в таком режиме;

компоновка ПТС с котельным оборудованием. При мазутной термоподготовке (например [36]) камера ТХПТ имеет внутренний диаметр, равный 630 мм, уменьшить который в несколько раз, по-видимому невозможно. Встроить такую камеру в существующую горелку практически не удается. Наиболее вероятное решение - установка камеры в специально созданной для нее амбразуре, что связано с дополнительными затратами на переоборудование котла. Вновь установленная, достаточно громоздкая оснастка, создаст определенные трудности в обслуживании котельного оборудования на рабочих площадках, где и без того часто наблюдается дефицит свободных площадей. Благодаря более высокой энергетической эффективности плазменной ТХПТ габариты ПТС позволяют встроить ее в основную горелку котла без изменения определяющих параметров последней;

экологические аспекты. При плазменной ТХПТ нагрев потока аэросмеси осуществляется в основном в результате горения определенной части угля. При этом азот топлива, ответственный за образование «топливных» оксидов азота, составляющих до 90-95 % выбросов NO<sub>x</sub>, выходит вместе с летучими угля и в условиях дефицита окислителя образует молекулярный азот. Из последнего могут образоваться только «термические» оксиды азота. Более того, из-за дефицита окислителя температура газов в ПТС существенно ниже температуры факела в топке

и «термические» оксиды азота практически не образуются. При мазутной ТХПТ необходимое для протекания процесса термохимической подготовки тепло поступает в результате горения мазута. Выгорание мазута должно быть полным. При этом должен быть обеспечен избыток кислорода, необходимый для термохимических преобразований угля в камере ТХПТ. Из-за более высокой реакционной способности мазута, в сравнении с углем, горение будет происходить в условиях повышенного избытка воздуха и при более высокой температуре, чем горение угля. В этом случае более вероятны условия для образования как «топливных», так и «термических» оксидов азота. Как правило, содержание серы в мазуте выше, чем в угле, что влечет за собой увеличение эмиссии оксидов серы. В мазуте присутствует ванадий, который образует канцероген – пятиокись ванадия. Ванадий также является причиной высокотемпературной коррозии поверхностей нагрева, а в угле его практически не бывает;

экономические показатели. Как правило, стоимость мазута в несколько раз выше стоимости угля в пересчете на условное топливо. Это делает использование ПТС для осуществления плазменной термохимической подготовки топлива к сжиганию быстро окупаемым (используемый ранее топочный мазут замещается самой угольной пылью). Срок окупаемости плазменной системы безмазутного воспламенения углей, как правило, не превышает 1-2 лет и зависит от соотношения цен на уголь, мазут и электроэнергию.

Для численного исследования плазменных технологий и проектирования оборудования для их осуществления используются следующие математические модели и компьютерные программы.

Автоматизированная программа термодинамических расчетов многокомпонентных гетерогенных систем TERRA [37].

Компьютерная программа «Плазма-уголь» для расчетов процессов движения, нагрева и кинетики термохимических превращений угольных смесей с различными окислителями (воздух, водяной пар, кислород, диоксид углерода) в плазменно-топливных системах (одномерная модель) [38].

Компьютерная программа «Плазма-муфель» для расчетов безмазутного воспламенения аэросмеси в муфелизированных плазменно-топливных системах [39, 40].

Компьютерные программы FLOREAN (Теплотехнический институт, г. Брауншвайг, Германия) [28], CINAR ICE (Империал Колледж Лондон, Великобритания) [41] и KIVA-F (Руанский Университет, Франция) для трехмерных расчетов топок пылеугольных энергетических котлов, в том числе оснащенных ПТС [42-44].

#### Компьютерные программы для термодинамического анализа

Для термодинамического анализа процессов широко используется универсальная программа расчета многокомпонентных гетерогенных систем TERRA, которая отработана для высокотемпературных процессов. В отличие от традиционных в химической термодинамике методов расчета параметров равновесия с использованием энергии Гиббса, констант равновесия и закона действующих масс Гульдберга и Вааге, универсальная программа термодинамических расчетов TERRA, базируется на принципе максимума энтропии для изолированных термодинамических систем, находящихся в состоянии равновесия. Методическую основу термодинамического расчета составляют фундаментальные законы термодинамики совместно с законами сохранения массы, энергии и электрического заряда. Это позволяет для закрытых термодинамических систем построить математическую модель для общего случая образования в равновесии газообразных и конденсированных веществ, электронейтральных и ионизированных компонентов.

В общем случае исследуемая система является гетерогенной, состоит из нескольких разнородных фаз, отделенных видимыми границами, и все индивидуальные газообразные вещества входят в один состав газовой фазы. Конденсированные компоненты могут образовывать отдельные фазы. При этом присутствие газовой фазы считается обязательным для любой из рассматриваемых систем, в то время как конденсированные вещества могут отсутствовать. Равновесие подобных систем в соответствии со вторым началом термодинамики характеризуется максимумом энтропии относительно термодинамических степеней свободы, к числу которых относятся температура (Т), давление (Р) и концентрации компонентов равновесной смеси Сі. После достижения полного термодинамического равновесия фазовый и химический составы рассматриваемых систем должны быть однозначно связаны с остальными параметрами состояния (P, T, r, U) где r и U- соответственно плотность и внутренняя энергия системы.

Программа TERRA обладает собственной базой термодинамических свойств индивидуальных веществ, которая постоянно пополняется и уточняется. В настоящее время в банке данных содержатся термодинамические функции для 3500 индивидуальных веществ в интервале температур 300-6000К. Расчеты термохимической плазменной подготовки угля в ПТС выполняются с помощью математической модели движения, теплопереноса и термохимических превращений пылеугольного топлива в горелочном устройстве с плазменным источником. Модель описывает двухфазный (угольные частицы и газ-окислитель) химически реагирующий поток, с внутренним источником тепла (электрическая дуга, плазменный факел или экзотермические реакции).

Аэросмесь поступает в камеру, в которой происходит тепломассообмен между газом и электрической дугой, газом и частицами, частицами различных фракций. Учитываются также гидродинамическое сопротивление и теплообмен со стенкой двухфазного реагирующего потока. Рассматриваются следующие химические превращения топлива и окислителя: выделение летучих из угля, их изменения в газовой фазе, а также реакции газификации углерода топлива. Система обыкновенных дифференциальных уравнений включает в себя уравнения концентраций компонентов (уравнения химической кинетики) вместе с уравнениями для скоростей и температур газа и частиц. Плазменный источник учтен в виде внутреннего источника тепла с эмпирическим распределением тепловыделения вдоль оси ПТС в уравнении сохранения энергии. Модель также отличается подробным описанием кинетики химических реакций (всего 116 химических реакций), общая схема которых, наряду с реакциями выделения первичных продуктов, учитывает реакции их дальнейших превращений. Температурная зависимость констант скорости описывается законом Аррениуса.

Математическая модель реализована в виде компьютерной программы «Плазма-уголь». Поскольку одномерная модель не позволяет учесть эффект радиальной неоднородности потока, была разработана полуэмпирическая модель добавления новых порций аэросмеси к первоначальной зоне реакций, создающейся при смешении плазменной струи с аэросмесью. Данная модель реализована в виде программы Плазмамуфель. В отличие от «Плазма-уголь», в программе «Плазма-муфель» состав газовой фазы рассчитывается, исходя из предположения термодинамического равновесия, которое оправдывается высокими скоростями протекания процессов превращений в газовой фазе по сравнению с реакциями на поверхности угольных частиц. Это допущение позволяет использовать для расчета химических взаимодействий и связанных с ними тепловых эффектов, а также концентраций компонентов газовой фазы универсальные термодинамические методы, использующие принцип максимума энтропии (программа TÊRRA), и отказаться от рассмотрения одновременно протекающих сотен химических реакций.

Компьютерные программы «Плазма-уголь» и «Плазма-муфель» проверены на тестовых примерах и показали свою работоспособность в условиях проведения серийных расчетов. Каждый расчет на персональном компьютере занимает около 90 секунд, что позволяет проводить серийные расчеты для параметрических анализов. Расчеты по программам дают возможность не только выяснить сущность процессов, приводящих к воспламенению угольных частиц под действием потока воздушной плазмы, но также определять геометрические параметры горелочного устройства для работы с конкретными типами углей.

Для математического моделирования процессов, происходящих в трехмерном пространстве топочных устройств при сжигании угля, используются компьютерные программы CINAR ICE, FLOREAN и KIVA-F, основанные на численном решении трехмерных уравнений переноса энергии и вещества с учетом химических реакций. Все три математические модели представляют собой сложную систему нелинейных трехмерных дифференциальных уравнений в частных производных, состоящую из уравнений неразрывности среды, состояния идеального газа и движения двухфазной среды, уравнений теплопереноса, химической кинетики и диффузии для компонентов реагирующей смеси с учетом радиационного и турбулентного переноса, описываемого с помощью k-е-модели турбулентности.

Во всех моделях рассматривается упрощенная химическая модель горения, в которой отсутствуют промежуточные реакции и образование промежуточных компонентов, учитывается лишь выделение летучих из угля, их окисление до оксидов углерода и выгорание углерода. Компьютерные программы позволяют определять компоненты скорости {u, v, w}, поля температур, давлений, концентраций продуктов горения, включая образование оксидов азота. Отметим, что в программах CINAR ICE и KIVA-F поведение газовой фазы двухфазного реагирующего потока описывается на основе подхода Эйлера, в то время как поведение индивидуальных частиц описывается на основе подхода Лагранжа. В программе FLOREAN для описания как газовой фазы так и частиц используется подход Эйлера, при котором предполагается, что скорость твердых частиц совпадает со скоростью газа, т.е. эффект проскальзывания – пренебрежимо мал.

Все указанные программы были верифицированы путем сравнения расчетных данных с результатами экспериментов в стендовых и натурных условиях [41 – 44].

#### Заключение

Современное состояние проблемы сжигания и переработки энергетических углей и методов повышения эффективности их использования на ТЭС, предприятиях металлургии и химической промышленности, обеспечивающих минимальный уровень вредных выбросов, требует разработки и применения новых технологий топливоиспользования, включая плазменные.

Одной из перспективных технологий топливоиспользования является плазменная технология воспламенения и сжигания энергетических углей, позволяющая заменить дешевым углем дорогостоящие и дефицитные газ и мазут на ТЭС и котельных. Плазменная технология безмазутной растопки котлов и стабилизации горения пылеугольного факела испытана на ряде ТЭС России, Казахстана, Украины, Китая, Монголии, Кореи, Словакии и Сербии.

Описаны теоретические и экспериментальные методы исследования и испытания плазменных процессов воспламенения, термохимической подготовки, сжигания и газификации углей. Представлены методы расчета ПТС, основанные на нульмерной, одномерных и трехмерных математических моделях.

Представлены основные принципы функционирования ПТС, обеспечивающие экологоэкономические преимущества, по сравнению с традиционными технологиями использования твердых топлив.

#### Литература

1 WCI. Coal Facts, Edition with 2004 data. - World Coal Institute, London, 2005.

- 2 British Petrol Statistical Review of World Energy, June 2011, British Petrol, London.
- 3 Key World Energy Statistics 2011 Edition, Internю Energy Agency, OECD/IEA, Paris.

4 Cletcins K. World power policy. Using a technology of a three-stage combustion for NOx suppression on solid fuel boilers in Europe and CIS //Opening Rep. Europ. Commission for Power Engineering and Transport. – Moscow: Russian J.S.Co. "United Power System of Russia". All-Russian Technical Institute. – 2000. – P. 4-17.

5 WCI 2000, Good News from Coal, World Coal Institute, London, http://www.wci-coal.com

6 Bilger R. W. The Future for Energy from Combustion of Fossil Fuels //Proc. of the 5<sup>th</sup> Internю Confю on Technologies and Combustion for a Clean Environment, 'Clean Air', 1999, Lisbon, Portugal. –1999. – Р. 617.

7 Бурдуков. А.П. Проблемы развития угольной теплоэнергетики. //Сб. II Межд. Симп. Горение и плазмохимия. – 2003. – С.40-47.

8 Drouet M.G. La technologie des plasmas. Potentiel d'application au Canada //Revue generale d'electricite -1986. - N 1. - P. 51-56.

9 Дьячков Б.Г., Полонский И.Я., Салимов М.А. и др. Интенсификация факельных процессов электрическим разрядом.-М.:Энергоатомиздат. – 1976. – 87с.

10 Дьячков Б.Г., Блинова В.А., Нефедова М.Г. Эффективность топливно – электрических процессов. – М.: Энергоа-томиздат, 1989. – 136 с.

11 Сеулин Н.А., Видин Ю.В. Пылеугольные растопочные горелки с электрозапальным устройством резисторного типа //Теплообмен в парогенераторах: Всесоюз. конф.- Новосибирск. – 1988. – С.187-190.

12 Сеулин Н.А., Осокин Л.Г., Иванников В.М. О безмазутной растопке и подсветке парогенераторов, сжигающих канско-ачинские угли //Электрические станции. – 1986. – № 10. – С.21-22.

13 Blackburn P.R. Ignition of pulverized coal with Arc Heated Air //Energy. – 1980. – Vol.4, № 3. – P. 98-99.

14 Blackburn P.R. Pulverized coal heated igniter system //Pat. №1585943 (B). – 1982. – № 3.

15 Cioffi P.L., Barsin A.A., Tattoli O.R. Plasma arc ignition of pulverized coal. Winter Meeting ASME.-Washington. Nowember 15020. – 1981. – P.5-9.

16 Tuppeny W.H. Effect of changing coal supply and steam generator design //Proc. American Power Conference. – 1978. – Vol.40. – P.367-380.

17 Duverger D., Ashard I.L. The upsurge plasmas in industry //Revue energetigue (France). - 1986. - Vol.37, No 385. - P.574-592.

18 Вербовецкий Э.Х., Котлер В.Р. Замена мазута углем при растопке и подсветке факела в пылеугольных котлах // Энергохозяйство за рубежом. – 1984. – №4. – С. 1-8.

19 Karpenko E. I., Karpenko Yu. E., Messerle V. E., Ustimenko A. B. Using Plasma-Fuel Systems at Eurasian Coal-Fired Thermal Power Stations //Thermal Engineering. – 2009. – Vol.56, N 6. – P.456-461.

20 Сакипов З.Б., Мессерле В.Е., Ибраев Ш.Ш. Электротермохимическая подготовка углей к сжиганию. – Алматы: Гылым, 1993. – 259 с.

21 Kalinenko R.A., Levitski A.A., Messerle V.E., Polak L.S. Sakipov Z.B., Ustimenko A.B. Pulverized Coal Plasma Gasification //Plasma Chemistry and Plasma Processing. – 1993. – Vol. 13. № 1. – P.141-167.

22 Жуков М.Ф., Карпенко Е.И., и др. Плазменная безмазутная растопка котлов и стабилизация горения пылеугольного факела/ Под ред. В.Е.Мессерле и В.С.Перегудова. – Новосибирск: Сиб. предрпр. РАН «Наука», 1995. – 304 с.

23 Карпенко Е.И., Буянтуев С.Л., и др. Плазмо-энергетические процессы и аппараты в решении природоохранных задач. – Улан-Удэ: БНЦ СО РАН, 1992. – 114 с.

24 Карпенко Е.И., Жуков М.Ф., Мессерле В.Е., Буянтуев С.Л., Дьяков А.Ф., Перегудов В.С. Научно-технические основы и опыт эксплуатации плазменных систем воспламенения углей на ТЭС (безмазутная растопка котлов и стабилизация горения пылеугольного факела). – Новосибирск: Наука. Сиб. предприятие РАН, 1998. – 137 с.

25 Карпенко Е.И., Мессерле В.Е. Введение в плазменно-энергетические технологии использования твердых топлив. – Новосибирк: Наука, Сиб.отд. РАН, 1997. – 118 с.

26 Карпенко Е.И., Мессерле В.Е. Плазменно-энергетические технологии использования твердых топлив. //Энциклопедия низкотемпературной плазмы. / Под ред. академика РАН Фортова, В.Е. – М.: Наука, 2000. – Т.4. – С.359-370.

27 Карпенко Е.И., Мессерле В.Е. Плазменно-энергетические технологии топливоиспользования. Т.1. Концепция и расчетно-теоретические исследования плазменно-энергетических технологий. – Новосибирск: Наука, Сиб. предприятие РАН, 1998. – 385 с.

28 Карпенко Е.И., Мессерле, В.Е., Журавель Н.М., Чурашев В.Н. Эколого-экономическая эффективность плазменных технологий переработки твердых топлив.- – Новосибирск: Наука. Сиб. изд. фирма РАН. – 2000. – 159 с.

29 Даутов Г.Ю., Тимошевский А.Н., Урюков Б.А., ..., Карпенко Е.И., Мессерле В.Е., Перегудов В.С., Устименко А.Б., ... Генерация низкотемпературной плазмы и плазменные технологии: Проблемы и перспективы (Плазменно-энергетические технологии для улучшения экологических и экономических показателей сжигания и газификации пылевидного угля, С.341-366). Низкотемпературная плазма. – Т. 20. – Новосибирск: Наука, 2004. – 464 с.

30 Янтайская электромеханическая компания "Лунюань" Лтд. Плазменная Технология Зажигания и Поддержания Горения на Пылеугольных Котлах //Электрические станции. – 2008. – № 2.

31 Gao H., Chui E., Runstedler A. Tang H. Numerical investigation of plasma ignition process in a utility boiler //Proc. of 6<sup>th</sup> International Workshop and Exibition on Plasma Assisted Combustion (IWEPAC), Heilbronn, Germany, 13-15 September. – 2010. – P. 69

32 Karpenko E.I., Messerle V.E., Ustimenko A.B. Plasma-aided solid fuel combustion //Proc. of the Combustion Institute. Elsevier. – 2007. – Vol. 31. Part II. – P. 3353-3360.

33 Messerle V.E., Karpenko E.I., Ustimenko A.B. Plasma Supported Coal Ignition and Combustion //Programme and abstracts for the International Conference on Coal Science and Technology (ICCS&T 2011), Oviedo-Spain 9-13 October, 2011, P.33-34, Proceedings. – P.A8.

34 Казанцев В.И., Ваврив Д.М., Канило П.М., Расюк Н.И., Шунеман К., Грицаенко С.В., Тымчик А.В., Мессерле А.В. Исследование СВЧ-плазменной технологии сжигания низкосортных углей //Теплоэнергетика. – 2002. – №12. – С.39-44.

35 Бритвин О.В. О мерах совершенствования топливной политики в электроэнергетике на перспективный период // Доклад на НТС РАО "ЕЭС России" и научного совета РАН 28.03.2000 г. – 27 с.

36 Мессерле В.Е., Сакипов З.Б., Синярев Г.Б., Трусов Б.Г. Термодинамический анализ плазмохимической переработки углей //Химия высоких энергий. – 1985. – Т.19, № 1. – С.160-162.

37 Keay M. The View from Europe – and elsewhere. – World Coal Institute, London, Oxford Energy Forum, February 2003. – Is. 52. www.worldcoal.org

38 WCI. Coal Power for Progress. – World Coal Institute, London, – 2000. http://www.wci-coal.com

39 Мессерле А. В. Математическое моделирование процессов термохимической подготовки пылеугольных топлив к сжиганию в горелочных устройствах с плазменным источником //Химия Высоких Энергий. – 2004. – Т.38, №1. – С.35-40.

40 Мессерле А. В. Численное исследование процессов плазмохимической подготовки пылеугольных топлив к сжиганию //Горение и плазмохимия. – 2003. – №1. – С.42–49.

41 Янкоски З., Локвуд Ф., Мессерле В.Е., Карпенко Е.И., Устименко А.Б. Моделирование плазменной подготовки угольной пыли к сжиганию //Теплофизика и аэромеханика. – 2004. – Т.11, № 3. – С. 473-486.

42 Камалова Г.А., Мессерле В.Е., Найманова А.Ж., Устименко А.Б. Моделирование турбулентных реагирующих течений в топочных устройствах //Теплофизика и аэромеханика. – 2008. – Т.15, № 1. – С. 149-161.

43 Мессерле В.Е., Устименко А.Б., Аскарова А.С., Нагибин А.О. Горение пылеугольного факела в топке с плазменно-топливной системой //Теплофизика и аэромеханика. – 2010. – Т. 17, № 3. – С.467-476.

44 Мессерле В.Е., Аскарова А.С., Устименко А.Б., Карпенко Е.И., Локтионова И.В. Оптимизация процесса сжигания энергетических углей с использованием плазменных технологий //Теплоэнергетика. – 2004. – №6. – С.60-65.

#### References

1 WCI, Coal Facts, 2005 Edition with 2004 data, World Coal Institute, London, 2005.

2 British Petrol Statistical Review of World Energy, British Petrol, London, June 2011.

3 Key World Energy Statistics 2011 Edition, International Energy Agency, (OECD/IEA, Paris, 2011).

4 K. Cletcins, World power policy. Using a technology of a three-stage combustion for NOx suppression on solid fuel boilers in Europe and CIS, Opening Rep. Europ. Commission for Power Engineering and Transport, (Moscow: Russian J.S.Co. "United Power System of Russia". All-Russian Technical Institute, 2000), pp. 4-17.

5 WCI 2000, Good News from Coal, World Coal Institute, London, (2000).

6 R.W. Bilger, The Future for Energy from Combustion of Fossil Fuels, Proc. of the 5<sup>th</sup> International Conference on Technologies and Combustion for a Clean Environment, 'Clean Air', 1999, Lisbon, Portugal, p. 617 (1999).

7 A.P. Burdukov, Problems of coal heat-and-power engineering, Proc. of II International Symposium on Combustion and plasmochemistry, 40-47 (2003). (in Russ).

8 M.G. Drouet, Revue generale d'electricite, 1, 51-56 (1986).

9 B.G. Diachkov, et al, Intensification of flame processes by electric discharge, (Moscow, Energoatomizdat, 1976), 87 p. (in Russ).

10 B.G. Diachkov, V.A. Blinova, and M.G. Nefedova, Efficiency of fuel-electrical processes, (Moscow, Energoatomizdat, 1989), 136 p. (in Russ).

11 N.A. Seulin and Yu.V. Vidin, Pulverised coal start up burners with electrical fuse device of resistor type, Proc. of All USSR conference on Heat exchange in steam generators, Novosibirsk, 187-190 (1988). (in Russ).

12 N.A. Seulin, et al, Electrical stations, 10, 21-22 (1986). (in Russ).

13 P.R. Blackburn, Energy, 4 (3), 98-99 (1980).

14 P.R. Blackburn Pulverized coal heated igniter system, Pat. №1585943 (B), 3 (1982).

15 P.L. Cioffi, A.A. Barsin, and O.R. Tattoli, Plasma arc ignition of pulverized coal, (Winter Meeting ASME, Washington, Nowember 15020, 1981), pp.5-9.

16 W.H. Tuppeny, Effect of changing coal supply and steam generator design, Proc. American Power Conference, 40, 367-380 (1978).

17 D. Duverger and I.L. Ashard, Revue energetigue (France), 37 (385), 574-592 (1986).

18 E.Kh. Verbovetski and V.R. Kotler, Energy management abroad, 4, 1-8 (1984). (in Russ).

19 E.I. Karpenko, Yu.E. Karpenko, V.E. Messerle, A.B. Ustimenko, Thermal Engineering, 56 (6), 456-461 (2009).

20 Z.B. Sakipov, V.E. Messerle, and Sh.Sh. Ibraev, Electrothermochemical preparation of coal to burning, (Almaty, Gilim, 1993), 259 p. (in Russ).

21 R.A. Kalinenko, et al, Plasma Chemistry and Plasma Processing, 13 (1), 141-167 (1993).

22 M.F. Zhukov, E.I. Karpenko, et al, Plasma oil-free start up of boilers and pulverised coal flame combustion stabilization, Ed. V.E. Messerle and V.S. Peregudov, (Novosibirsk, Siberian enterprise RAS «Nauka», 1995), 304 p. (in Russ).

23 E.I. Karpenko, et al, Plasma-power processes and devices in nature conservation tasks solution, (Ulan-Ude, BSC SB RAS, 1992), 114 p. (in Russ).

24 E.I. Karpenko, et al, Scientific and technical basis and experience of exploitation of plasma systems for coal ignition at TPP (oil-free start up of the boilers and pulverized coal flame stabilization), (Novosibirsk, Nauka. Siberian enterprise RAS, 1998), 137 p. (in Russ).

25 E.I. Karpenko, V.E. Messerle, Introduction in plasma-power technologies of solid fuels utilization, (Novosibirsk, Nauka. Siberian enterprise RAS, 1997), 118 p. (in Russ).

26 E.I. Karpenko, V.E. Messerle, Plasma-power technologies of solid fuels utilization. // Encyclopedia of low temperature plasma, Ed. Academician of RAS V.E. Fortov, (Moscow, Nauka, 2000), Vol.4, 359-370. (in Russ).

27 E.I. Karpenko, V.E. Messerle, Plasma-power technologies of fuel use. V.1. Concept and design-theoretical researches of plasma-power technologies, (Novosibirsk: Nauka. Siberian enterprise RAS, 1998), 385 p. (in Russ). (in Russ).

28 E.I. Karpenko, V.E. Messerle, N.M. Zhuravel, V.N. Churashev Eco-economic efficiency of plasma technologies of solid fuel processing, (Novosibirsk, Nauka. Siberian enterprise RAS, 2000), 159 p. (in Russ).

29 G.Yu. Dautov, A.N. Timoshevski et al, Generation of low temperature plasma and plasma technologies: Problems and perspectives (Plasma-power technologies for improvement of ecological and economical indexes of dust coal incineration and gasification, pp.341-366). Low-temperature plasma, Vol. 20, (Novosibirsk, Nauka, 2004), 464 p. (in Russ).

30 Yantai electromechanical company "Lunian" Ltd, Plasma Technology of Ignition and Combustion Stabilization at Pulverized Coal Fired Boilers, Electrical stations, 2 (2008). (in Russ).

31 H. Gao, E. Chui, A. Runstedler, H.Tang Numerical investigation of plasma ignition process in a utility boiler //Proc. of 6<sup>th</sup> Intern. Workshop and Exibition on Plasma Assisted Combustion (IWEPAC), Heilbronn, Germany, 13-15 September, pp. 69 (2010).

32 E.I. Karpenko, V.E. Messerle, A.B. Ustimenko Plasma-aided solid fuel combustion, Proce. of the Combustion Institute, Elsevier, 31, (II), 3353-3360 (2007).

33 V.E. Messerle, E.I. Karpenko, A.B. Ustimenko Plasma Supported Coal Ignition and Combustion, Programme and abstracts for the Intern. Conf. on Coal Science and Technology (ICCS&T 2011), Oviedo-Spain 9-13 October, 33-34 (2011). 34 V.I. Kazantsev, et al, Thermal Engineering, 49 (12), 1006-1011 (2002). (in Russ).

35 O.V. Britvin About arrangements of fuel politics perfection in power engineering on perspective period, Report at STU of RJC "UES Russia" and Scientific Council of RAS 28.03.2000, 27 p. (in Russ).

36 V.E. Messerle, et al, High Energy Chemistry, 19 (1), 160-162 (1985). (in Russ).

37 M. Keay, The View from Europe – and elsewhere, World Coal Institute, (London, Oxford Energy Forum, Issue 52, February 2003).

38 WCI, Coal Power for Progress, World Coal Institute, London, (2000).

39 A.V. Messerle, High Energy Chemistry, 38 (1), 35-40 (2004). (in Russ).

40 A.V. Messerle, Combustion and plasmachemistry, 1, 42–49 (2003). (in Russ).

41 Z. Jankoski, et al, Thermophysics and Aeromechanics, 11 (3), 461-474 (2004). (in Russ).

42 G.A. Kamalova, et al, Thermoph. and Aeromechanics, 15 (1), 139-151 (2008). (in Russ).

43 V.E. Messerle, et al, Thermoph. and Aeromechanics, 17 (3), 435-444 (2010). (in Russ).

44 V.E. Messerle, et al, Thermal Engineering, 51 (6), 488-493 (2004). (in Russ).

# 5-бөлім БЕЙСЫЗЫҚ ФИЗИКА. РАДИОФИЗИКА

# Section 5 NONLINEAR PHYSICS. RADIOPHYSICS

Раздел 5 НЕЛИНЕЙНАЯ ФИЗИКА. РАДИОФИЗИКА

https://bph.kaznu.kz

МРНТИ 29.35.29, 41.51.41, 28.23.37, 28.23.15

https://doi.org/10.26577/RCPh.2020.v75.i4.09

## Д.М. Жексебай 🐌, С.А. Хохлов 🕩, Е.Т. Кожагулов ២

Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Казахстан, г. Алматы \*e-mail: zhexebay92@gmail.com

## ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ПАРАМЕТРОВ И КЛАССИФИКАЦИЯ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ОТТОКОВ С ПОМОЩЬЮ СВЕРТОЧНЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

В современной астрофизике машинное обучение приобретает все большую популярность благодаря своей невероятно мощной способности делать прогнозы или рассчитывать предположения для больших объемов данных. Мы описываем применение машинного обучения к регрессии параметров молекулярного оттока (масса, импульс, кинетическая энергия и динамическое время) и классификации биполярного оттока с использованием сверточных нейронных сетей. Размер нашей обучающей выборки составляет ~ 125 источников молекулярного оттока для классификации, то есть 80% от общего количества данных, где 67 источников является биполярным оттоком и ~ 75 источников биполярного оттока для регрессии. Полученные результаты показывают, что использование CNN повышает точность классификации изображения до 97%. Модель регрессии позволяет предсказывать параметры молекулярного оттока со средней абсолютной процентной ошибкой 37.7% для обучающих данных и со средней абсолютной ошибкой 88.0 (масса), 1237.7 (импульс), 193.3 (кинетическая энергия) и 3.0 (динамическое время) для тестовых данных. Алгоритм машинного обучения уменьшает время обработки данных для прогнозов и классификации, и эта методология имеет широкую перспективу применения в будущих исследованиях задач астрофизики.

Ключевые слова: радиоастрономия, звездообразование, биполярные оттоки, машинное обучение, сверточные нейронные сети.

D.M. Zhexebay<sup>\*</sup>, S.A. Khokhlov, Y.T. Kozhalgulov Al-Farabi Kazakh National University, Kazakhstan, Almaty <sup>\*</sup>e-mail: zhexebay92@gmail.com

# Prediction of parameters and classification of molecular outflows using convolutional neural networks

Machine learning is gaining popularity in modern astrophysics for its incredibly powerful ability to make predictions or make assumptions over large amounts of data. We describe the application of machine learning to regression of molecular outflow parameters (mass, momentum, kinetic energy, and dynamic time) and classification of bipolar outflow using convolutional neural networks. The size of our training sample is ~ 125 sources of molecular outflow for classification, that is, 80% of the total amount of data, where 67 sources are bipolar outflow and ~ 75 sources of bipolar outflow for regression. The results show that the use of CNN improves the image classification accuracy up to 97%. The regression model predicts molecular outflow parameters with an average absolute percentage error of 37.7% for the training data and with an average absolute error of 88.0 (mass), 1237.7 (momentum), 193.3 (kinetic energy), and 3.0 (dynamic time) for test data. The machine learning algorithm reduces data processing time for predictions and classification, and this methodology has a broad prospect for future studies of astrophysics problems.

**Key words:** radio astronomy, star formation, bipolar outflows, machine learning, convolutional neural networks.

Д.М. Жексебай\*, С.А. Хохлов, Е.Т. Кожағулов

Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Қазақстан, Алматы қ. \*e-mail: zhexebay92@gmail.com

# Үйірткілі нейрондық желілерді қолданып молекулалық сырт ағындардың параметрлерін болжау және жіктеу

Заманауи астрофизикада машиналық оқыту үлкен көлемдегі мәліметтер үшін болжам жасауда немесе жорамалдарды есептеуде керемет қуаттылығының арқасында танымалдығы артып келеді. Біз машиналық оқытуды молекулалық сырт ағын параметрлеріне (масса, импульс, кинетикалық

энергия және динамикалық уақыт) болжам жасауда және үйірткілі нейрондық желілерді қолдана отырып, биполярлы сырт ағындардың жіктелуіне қолдануды сипаттаймыз. Біздің оқу үлгісінің мөлшері – жіктеу үшін ~ 125 молекулалық сырт ағын дереккөзін құрайды, яғни мәліметтердің жалпы көлемінің 80% құрайды, мұндағы 67 дереккөздер биполярлық ағындар болып табылады және ~ 75 биполярлық ағын дереккөзі регрессия үшін қолданылды. Нәтижелер көрсеткендей, CNN-ді пайдалану кескінді жіктеу дәлдігін 97% дейін жақсартады. Регрессия моделі жаттығу деректері үшін орташа абсолюттік пайыздық қателігі 37,7% құрады және абсолюттік қателігі 88,0 (масса үшін), 1237,7 (импульс үшін), 193,3 (кинетикалық энергия үшін) және 3,0 (динамикалық уақыт үшін) шамасында молекулалық сырт ағынның параметрлерін болжай алады. Машиналық оқыту алгоритмі болжау мен жіктеу үшін мәліметтерді өңдеу уақытын қысқартады және бұл әдістеме болашақ астрофизика мәселелерін зерттеу үшін үлкен үміт береді.

**Түйін сөздер:** радиоастрономия, жұлдыздардың пайда болуы, биполярлық сырт ағындар, машиналық оқыту, үйірткілі нейрондық желілер.

#### Введение

Применение методов машинного обучения (ML) для анализа наборов астрофизических данных стало чрезвычайно популярным, особенно по мере того, как вычислительные мощности и сложные алгоритмы становятся более мощными и доступными. Крупные наблюдательные обзоры предоставили массивные наборы данных для разработки инструментов машинного обучения для решения прикладных задач астрофизики, что сделало машинное обучение еще более привлекательным [1]. Методы машинного обучения были применены для классификации звезд/галактик и определении физических параметров [2-11]. Еще одним успехом ML в астрофизике стало использование архитектуры глубокой нейронной сети для анализа звездных спектров [12]. В работе [12] показали, что параметры звезд (температура, сила тяжести и металличность) из всей спектральной базы данных SDSS-III APOGEE могут быть определены с такой же точностью и точностью, что и конвейер АРОGEE, всего за несколько секунд с помощью машинного обучения. А также, машинное обучение позволяет быстро и точно определять особенности молекулярного оттока. Несколько алгоритмов машинного обучения были использованы для определения характеристик молекулярных оттоков [13-19]. Метод опорных векторов (SVM) использовались, чтобы отличить остаток сверхновой звезды от окружающего газа [13] и идентифицировать молекулярные оттоки в комплексе темных облаков [18]. В работе [18] приняли SVM для определения характеристик оттока в выбросах <sup>12</sup>CO и <sup>13</sup>CO в Cygnus. SVM хорошо справляется с задачами классификации, но для создания обучающего набора требуется ручное извлечение признаков. Алгоритмы Random Forest, которые классифицируют векторы признаков, изучая серию правил принятия решений, надежно работают при обнаружении звездных пузырей в выбросе пыли [14,19]. Подобно SVM, Random Forest требуют ручного извлечения функций в качестве входных данных. Сверточные нейронные сети (CNN) это новый мощный подход машинного обучения, применяемый для идентификации структур или объектов. CNN не чувствительны к положению объектов в данных, поэтому их несложно применить к крупным обзорам. Что наиболее важно, CNN не требует ручного извлечения признаков в качестве входных данных. Вместо этого CNN автоматически извлекает признаки из данных, применяя различные фильтры на разных уровнях во время обучения [20-25]. Алгоритмы, основанные на CNN, были разработаны и успешно применены для идентификации пузырей (область разреженного горячего газа неправильной формы в межзвёздной среде) [15-16], а также для идентификации и прогнозировании физических параметров протозвездных оттоков [17].

#### Модель сверточной нейронной сети

Нейронные сети имеют множество параметров. Эти параметры определяют саму сеть (например, размер и нелинейность каждого уровня) и определяют обучение сети (например, размер мини-пакета или скорость обучения). Кроме того, архитектура нейронной сети может существенно повлиять на ее производительность. В этом разделе мы даем краткое описание ключевых параметров и архитектуру нашей модели.

Общая архитектура рассмотренной модели для классификации изображения показана на рисунке 1. Сеть состоит из 5 обучаемых слоев, где 3 из них сверточные слои и 2 полностью связанные слои. Первый сверточный слой фильтрует входное изображение 150 × 150 × 3 с 32 фильтрами размером 5 × 5. Во всех слоях, кроме выходного слоя, была применена функция активации ReLU. Максимальное объединение с фильтрами размера 2 × 2 следует за сверточным слоем. Второй и третий сверточный слой имеет 64 и 128 фильтров с размером 3 × 3 и 2 × 2 соответственно. Первый полностью связанный слой имеет 256 каналов, а второй выполняет двоичную классификацию. Выходные значения последнего полностью связанного слоя обрабатывается через функцию softmax. Для обучения наших моделей мы используем алгоритм RMSprop со скоростью обучения 0.0004 и мини-пакетный градиентный спуск с размером пакета 16.



Рисунок 1 – Архитектура сверточной нейронной сети для классификации данных

Архитектура нашей модели для регрессии показана на рисунке 2. Размеры слоев, количества фильтров и функции активации сверточных слоев соответствует выше упомянутой модели классификации, но отличается количеством нейронов и функцией активаций выходного слоя, а также отличается алгоритмом обучения. На выход последнего полностью связанного слоя подается линейная функция. Модель для прогнозирования параметров обучен с помощью алгоритма Adam со скоростью обучения 0.001.



Рисунок 2 – Архитектура сверточной нейронной сети для прогнозирования данных

Для реализации нашей модели мы используем программный пакет Python и библиотеку Keras работающий поверх платформы машинного обучения TensorFlow. Библиотека TensorFlow упрощает использование графического процессора для вычислений, а использование графического процессора позволяет примерно на порядок более быстрое обучение, чем использование только центрального процессора.

Набор данных для классификации составляет 157 источников, которые 84 является биполярными оттоками. Данные были взяты из работы [26]. Первая модель классификации имеет 110 источников для обучения и 47 источников для тестирования, то есть процентная соотношения выборок 70/30 процентов от общего количества данных. Вторая модель классификации имеет процентное соотношение 80/20 для обучающих и тестовых данных. На рисунке 3 показана зависимость точности и потери модели нейронной сети от эпохи обучения двух модели классификации для тестовых данных. Результаты показывают высокую точность второй модели, а также минимальную потерю модели нейронной сети, чем первая модель.



Рисунок 3 – Зависимость точности и потери модели нейронной сети от эпохи обучения для тестовых данных при соотношении обучающих и тестовых данных 70/30 (а) и 80/20 (б)

Набор данных для прогнозирования параметров составляет 84 источников. Обучающая выборка – 75, тестовая 9. В качестве метрики мы использовали МАЕ (Средняя абсолютная ошибка) и МАРЕ (Средняя абсолютная процентная ошибка) для решения проблем регрессии. Поэтому по были созданы две модели прогнозирования. Зависимость потери двух моделей от эпохи обучения приведена на рисунке 4. Результаты обучения показывают, что обучающие данные второй модели точнее прогнозирует, чем тестовые данные.



Рисунок 4 – Зависимость потери двух модели (1-модель (а), 2-модель (б)) нейронной сети от эпохи обучения для обучающих (синяя линия) и тестовых данных (красная линия) при выборе метрики качества обучения МАЕ (а) и МАРЕ (б)

#### Результаты и обсуждения

В этом разделе мы сначала описываем показатели производительности, которые использовались для оценки моделей. Затем мы представляем эффективность классификации и прогнозирования нашей модели.

Точность модели определяется по следующей формуле:

$$ACC = \frac{TP + TN}{P + N} \tag{1}$$

где, *ТР* – количества истинных биполярных оттоков, классифицированных как биполярные оттоки (истинно положительный результат), *TN* – истинно отрицательный результат, *P* – общее количество биполярных оттоков, *N* – общее ко-

личество оттоков, которые не являются биполярным оттоком.

Точность модели классификации приведен в таблице 1 для разных количеств обучающего набора данных. Результаты показывают то, что чем больше обучающих данных, тем более высокая точность. Модель классификации имеет 100 процентную точность для двух модели, однако вторая модель имеет точность ~ 97% при соотношении обучающих и тестовых данных 80/20 для тестовых данных.

Таблица 1 – Результат тестирования для разных наборов данных

Nº	Количества обучающих и тестовых данных	Точность обучающих и тестовых данных (%)
1	110 и 47	100 и 85.1
2	125 и 32	100 и 96.9

Мы используем тестовые данные, чтобы оценить, насколько точно можно определить физические свойства по биполярным оттокам. Мы применяем обе модели регрессии к тестовой выборке. На рисунке 5 показаны физические параметры оттока (масса, импульс, кинетическая энергия и динамическое время), оцененная для двух моделей, model 1 и model 2. Мы также наносим на график истинную массу, импульса, энергию и динамической времени оттока, которые были взяты из работы [26]. Мы обнаружили, что model 2 переоценивает массу молекулярного оттока в 2,7 или более раз, в то время как model 1 правильно предсказывает массу молекулярного оттока с разбросом в два раза (Рисунок 5, а). На рисунке 5 (б) показано, что импульс, предсказанный моделью 2, в 1,87 раза выше, чем импульс, предсказанный моделью 1. Результаты показывают эффективность модели прогнозирования model 1, где результаты сопоставимы с результатами работы [16-17].

Оценка ошибки прогнозирования приведены в таблицах 2 и 3. В таблице 2 показано значение средней абсолютной ошибки первой модели регрессии и средней абсолютной процентной ошибки второй модели. По этим данным трудно сказать эффективности модели, но по результатам тестирования можно определить эффективность моделей (Рисунок 5). Результаты эффективной модели прогнозирования физических параметров молекулярного оттока показаны в таблице 3.



Рисунок 5 – Зависимость параметров оттока (масса (а), импульс (б), кинетическая энергия (в) и динамическое время (г)) от прогнозируемых характеристик двух модели для обучающих (○, □) и тестовых (●, ■) данных.

LOULDIN	$I = Pegy_{\Pi I} TgTII$	молелеи г	normonu	VDDJIII4	TOTHIN IV
таолица 4	= 1 Covindial Di	моделент	прогнозиг	лования	даппыл
		- /	r · · · r		,

№ модели	МАЕ для обучающих и тестовых данных	МАРЕ для обучающих и тестовых данных
1	<b>0.0246</b> и 0.0831	-
2	-	<b>34.6571</b> и 909.7830

Таблица 3 – Результаты прогнозирования первой модели обучающих и тестовых данных

	масса	импульс	кинетическая энергия	динамическое время
MAE	16.8 / 88.0	190.6 / 1237.7	25.8 / 193.3	0.7 / 3.0
MAPE	45.9 % / 198.1 %	44.5 % / 271.4 %	44.3 % / 370.5 %	<b>16.0 %</b> / 58.4 %

#### Выводы

Мы применяем метод глубокого обучения для определения параметров молекулярных оттоков и классификации биполярных оттоков. Создавая разные обучающие выборки, мы разрабатываем две модели глубокого машинного обучения. Модель классификации может определить биполярные оттоки. Модель прогнозирования предсказывает долю массы, импульса, энергии и динамическое время связанную с оттоком. Наши основные выводы заключаются в следующем:

 Мы применяем модель классификации и успешно идентифицируем ранее визуально идентифицируемых биполярных оттоков с точностью 97%.

2. Модель регрессии успешно предсказывает физические параметры, например, долю массы, импульса, энергии и времени, полученны результате оттока.

3. Масса оттока, предсказанная моделью 1, сравнима с массой оттока, рассчитанной [26].

Импульс 1179.71  $M_{\odot}km s^{-1}$ , и кинетическая энергия 124.052 ×  $10^{45} erg$  от оттока в источнике G010.284-00.114 того же порядка, что и расчеты в работе [26], которые составляют 945.2  $M_{\odot}km s^{-1}$  и 137.24 ×  $10^{45} erg$  соответственно.

#### Литература

1 Venn K., Fabbro S., Liu A., Hezaveh Y., Levasseur L., Eadie G., Ellison S., Woo J., Kavelaars J., Moo Yi K., Hlozek R., Bovy J., Teimoorinia H., Ravanbakhsh S., Spencer L. Machine Learning Advantages in Canadian Astrophysics //CLRP. – 2019. – Vol. 2020. – P. 5.

2 Bai Y., Liu J., Wang S., Yang F. Machine Learning Applied to Star–Galaxy–QSO Classification and Stellar Effective Temperature Regression //The Astronomical Journal. – 2018. – Vol. 157. – P. 9.

3 Martin G., Kaviraj S., Hocking A., Read S.C., Geach J.E. Galaxy morphological classification in deep-wide surveys via unsupervised machine learning //Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. – 2020. – Vol. 491. – P. 1408-1426.

4 Bai Y., Liu J.F., Wang S. Machine learning classification of gaia data release 2 //Research in Astronomy and Astrophysics. – 2018. – Vol. 18. – P. 118.

5 Ghosh A., Urry C.M., Wang Z., Schawinski K., Turp D., Powell M.C. Galaxy Morphology Network: A Convolutional Neural Network Used to Study Morphology and Quenching in□ 100,000 SDSS and□ 20,000 CANDELS Galaxies //The Astrophysical Journal. – 2020. – Vol. 895. – P. 112.

6 Kim E.J., Brunner R.J. Star-galaxy classification using deep convolutional neural networks //Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. – 2017. – Vol. 464. – P. 4463-4475.

7 Akras S., Leal-Ferreira M.L., Guzman-Ramirez L., Ramos-Larios G. A machine learning approach for identification and classification of symbiotic stars using 2MASS and WISE //Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. – 2019. – Vol. 483. – P. 5077-5104.

8 Sharma K., Kembhavi A., Kembhavi A., Sivarani T., Abraham S., Vaghmare K. Application of convolutional neural networks for stellar spectral classification //Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. – 2020. – Vol. 491. – P. 2280-2300.

9 Lukic V., Brüggen M., Mingo B., Croston J.H., Kasieczka G., Best P.N. Morphological classification of radio galaxies: capsule networks versus convolutional neural networks //Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. – 2019. – Vol. 487. – P. 1729-1744. 10 Zhu X.P., Dai J.M., Bian C.J., Chen Y., Chen S., Hu C. Galaxy morphology classification with deep convolutional neural networks //Astrophysics and Space Science. - 2019. - Vol. 364. - P. 55.

11 Liu W., Zhu M., Dai C., He D.Y., Yao J., Tian H.F., Wang B.Y., Wu K., Zhan Y., Chen B.Q., Luo A.L., Wang R., Cao Y., Yu X.C. Classification of large-scale stellar spectra based on deep convolutional neural network //Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. – 2019. – Vol. 483. – P. 4774-4783.

12 Fabbro S., Venn K.A., O'Briain T., Bialek S., Kielty C.L., Jahandar F., Monty S. An application of deep learning in the analysis of stellar spectra //Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. – 2018. – Vol. 475. – P. 2978-2993.

13 Beaumont C.N., Williams J.P., Goodman A.A. Classifying Structures in the Interstellar Medium with Support Vector Machines: The G16. 05-0.57 Supernova Remnant //The Astrophysical Journal. – 2011. – Vol. 741. – P. 14.

14 Beaumont C.N., Goodman A.A., Kendrew S., Williams J.P., Simpson R. The Milky Way Project: leveraging citizen science and machine learning to detect interstellar bubbles //The Astrophysical Journal Supplement Series. – 2014. – Vol. 214. – P. 3.

15 Van Oort C.M., Xu D., Offner S.S., Gutermuth R.A. Casi: A convolutional neural network approach for shell identification //The Astrophysical Journal. – 2019. – Vol. 880. – P. 83.

16 Xu D., Offner S.S., Gutermuth R., Van Oort C. Application of Convolutional Neural Networks to Identify Stellar Feedback Bubbles in CO Emission //The Astrophysical Journal. – 2020. – Vol. 890. – P. 64.

17 Xu D., Offner S.S., Gutermuth R., Van Oort C. Application of Convolutional Neural Networks to Identify Protostellar Outflows in CO Emission //arXiv preprint arXiv:2010.12525. – 2020.

18 Zhang S., Yang J., Xu Y., Chen X., Su Y., Sun Y., Zhou X., Li Y., Lu D. Searching for Molecular Outflows with Support Vector Machines: The Dark Cloud Complex in Cygnus //The Astrophysical Journal Supplement Series. – 2020. – Vol. 248. – P. 15.

19 Xu D., Offner S.S.R. Assessing the performance of a machine learning algorithm in identifying bubbles in dust emission // The Astrophysical Journal. – 2017. – Vol. 851. – P. 149.

20 Krizhevsky A., Sutskever I., Hinton G.E. Imagenet classification with deep convolutional neural networks //Communications of the ACM. - 2017. - Vol. 60. - P. 84-90.

21 Girshick R. Fast r-cnn //Proceedings of the IEEE international conference on computer vision. - 2015. - P. 1440-1448.

22 Ren S., He K., Girshick R., Sun J. Faster r-cnn: Towards real-time object detection with region proposal networks //IEEE transactions on pattern analysis and machine intelligence. – 2017. – Vol. 39. – P. 1137.

23 Redmon J., Divvala S., Girshick R., Farhadi A. You only look once: Unified, real-time object detection //Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition. – 2016. – P. 779-788.

24 Zhao L., Li S. Object Detection Algorithm Based on Improved YOLOv3 //Electronics. - 2020. - Vol. 9. - P. 537.

25 Yao G., Lei T., Zhong J. A review of Convolutional-Neural-Network-based action recognition //Pattern Recognition Letters. - 2019. - Vol. 118. - P. 14-22.

26 Li Q., Zhou J., Esimbek J., He Y., Baan W.A., Li D., Wu G., Tang X., Ji W., Zhexebay D. High-mass Outflows Identified from COHRS CO (3–2) Survey //The Astrophysical Journal. – 2018. – Vol. 867. – P. 167.

#### References

1 K. Venn, S. Fabbro, A. Liu et al, CLRP, 2020, 5 (2019).

2 Y. Bai, J. Liu, S. Wang, and F. Yang, The Astronomical Journal, 157, 9 (2018).

3 G. Martin, S. Kaviraj, A. Hocking, S.C. Read, and J.E. Geach, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 491, 1408-1426 (2020).

4 Y. Bai, J.F. Liu, and S. Wang, Research in Astronomy and Astrophysics, 18, 118 (2018).

5 A. Ghosh, C.M. Urry, Z. Wang, K. Schawinski, D. Turp, and M.C. Powell, The Astrophysical Journal. 895, 112 (2020).

6 E.J. Kim, and R.J. Brunner, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 464, 4463-4475 (2017).

7 S. Akras, M.L. Leal-Ferreira, L. Guzman-Ramirez, and G. Ramos-Larios, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 483, 5077-5104 (2019).

8 K. Sharma, A. Kembhavi, A. Kembhavi, T. Sivarani, S. Abraham, and K. Vaghmare Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 491, 2280-2300 (2020).

9 V. Lukic, M. Brüggen, B. Mingo, J.H. Croston, G. Kasieczka, and P.N. Best, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 487, 1729-1744 (2019).

10 X.P. Zhu, J.M. Dai, C.J. Bian, Y. Chen, S. Chen, and C. Hu, Astrophysics and Space Science, 364, 55 (2019).

11 W. Liu, M. Zhu, C. Dai, D.Y. He, J. Yao, H.F. Tian, B.Y. Wang, K. Wu, Y. Zhan, B.Q. Chen, A.L. Luo, R. Wang, Y. Cao, and X.C. Yu, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 483, 4774-4783 (2019).

12 S. Fabbro, K.A. Venn, T. O'Briain, S. Bialek, C.L. Kielty, F. Jahandar, S. Monty, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 475, 2978-2993 (2018).

13 C.N. Beaumont, J.P. Williams, and A.A. Goodman, The Astrophysical Journal, 741, 14 (2011).

14 C.N. Beaumont, A.A. Goodman, S. Kendrew, J.P. Williams, and R. Simpson, The Astrophysical Journal Supplement Series, 214, 3 (2014).

15 C.M. Van Oort, D. Xu, S.S. Offner, and R.A. Gutermuth, The Astrophysical Journal. 880, 83 (2019).

16 D. Xu, S.S. Offner, and R.A. Gutermuth, and C. Van Oort, The Astrophysical Journal. 890, 64 (2020).

17 D. Xu, S.S. Offner, and R.A. Gutermuth, and C. Van Oort, arXiv preprint arXiv:2010.12525, (2020).

18 S. Zhang, J. Yang, Y. Xu, X. Chen, Y. Su, Y. Sun, X. Zhou, Y. Li, and D. Lu, The Astrophysical Journal Supplement Series, 248, 15 (2020).

19 D. Xu, and S.S.R. Offner, The Astrophysical Journal, 851,149 (2017).

20 A. Krizhevsky, I. Sutskever, G.E. Hinton, Communications of the ACM, 60, 84-90 (2017).

21 R. Girshick, Proceedings of the IEEE international conference on computer vision (Santiago, 7-15 December, 2015), p.1440-1448.

22 S. Ren, K. He, R. Girshick, and J. Sun, IEEE transactions on pattern analysis and machine intelligence, 39, 1137 (2017).

23 J. Redmon, S. Divvala, R. Girshick, and A. Farhadi, Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition (Las Vegas, 27-30 June, 2016), p.779-788.

24 L. Zhao, and S.Li, Electronics. 9, 537 (2020).

25 G. Yao, T. Lei, and J. Zhong, Pattern Recognition Letters, 118, 14-22 (2019).

26 Q. Li, J. Zhou, J. Esimbek, Y. He, W.A. Baan, D. Li, G. Wu, X. Tang, W. Ji, D. Zhexebay, The Astrophysical Journal. 867, 167 (2018).

https://bph.kaznu.kz

МРНТИ 29.05.45; 41.17.15; 29.15.33

#### https://doi.org/10.26577/RCPh.2020.v75.i4.10

# Е.С. Мухамеджанов<sup>1\*</sup>, О.А. Каликулов<sup>1</sup>, С.К. Шинбулатов<sup>2</sup>, А.И. Жумабаев<sup>1</sup>, Ш.Б. Утей<sup>1</sup>, Н.О. Ережеп<sup>2</sup>, А.Н. Седов<sup>2</sup>, У.С. Сәрсенбай<sup>1</sup>, А.Е. Бақтораз<sup>1</sup>, Н.О. Садуев<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Физико-технический инстиут, Казахстан, г. Алматы <sup>2</sup>Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН (ФИАН), Россия, г. Москва \*e-mail: y.mukhamejanov@gmail.com

### РАЗРАБОТКА МЕТОДИКИ И АППАРАТУРЫ ДЛЯ ИЗМЕРЕНИЯ ПЛОТНОСТИ ПОТОКА НЕЙТРОНОВ ОТ РЕАКТОРА ВВР-К

Исследовательский реактор является мощным источником нейтронного и гамма-излучения, возникающих в результате протекающих в реакторе ядерных реакций. В данной статье предлагается использование счетчиков нейтронов типа СНМ-18. Предлагается разработка методики эффективного измерения нейтронного фона при помощи переносных газоразрядных нейтронных счетчиков, а также наладка и подготовка системы регистрации, разработка электронной части детекторов большой площади.

Создание автоматической системы, включающей в себя комплекс аппаратуры для непрерывного автоматического, дистанционного и экспрессного определения количественной оценки потока нейтронов от ядерного реактора в режиме реального времени. Разрабатываемая аппаратура применяема для практического использования метода определения плотности потока нейтронов, что даст возможность учесть закономерности пространственного изменения поля нейтронов. Эти нейтроны имеют энергии порядка нескольких МэВ и их угловое распределение практически изотропно. Проведены работы по отработке различных конфигурации замедлителей и отражателей для потока нейтронов от реактора BBP-К. Разработанная методика позволит сделать выводы о распределении потоков нейтронов в здании, где располагается реактор, а также влиянии этих потоков на окружающую среду от работающего исследовательского реактора BBP-К, расположенного вблизи города Алматы.

**Ключевые слова:** нейтроны, нейтронные счетчики, детектор нейтронов, усилитель, поток нейтронов, реактор BBP-K.

Ye.S. Mukhamejanov<sup>1\*</sup>, O.A. Kalikulov<sup>1</sup>, S.K. Shinbulatov<sup>1</sup>, A.I. Zhumabayev<sup>1</sup>, Sh.B. Utey<sup>1</sup>, N.O. Yerezhep<sup>1</sup>, A.N. Sedov<sup>1</sup>, U.S. Sarsenbay<sup>1</sup>, A.Y. Baktoraz<sup>1</sup>, N.O. Saduyev<sup>2</sup> <sup>1</sup>Institute of Physics and Technology, Kazakhstan, Almaty <sup>2</sup>The Lebedev Physical Institute of the Russian Academy of Sciences, Russia, Moscow \*e-mail: y.mukhamejanov@gmail.com

#### Development of method and equipment for measuring the density of neutron flux from the reactor WWR-K

The research reactor is a powerful source of neutron and gamma radiation resulting from nuclear reactions occurring in the reactor. Our project proposes the use of neutron counters of the SNM-18 type. Development of a method for the effective measurement of neutron background using portable gasdischarge neutron counters, also an adjustment and preparation of the registration system, development of the electronic part of detectors with large-area is proposed.

To create an automatic system that includes a set of equipment for continuous automatic, remote and rapid quantitative assessment of the neutron flux from a nuclear reactor in the mode real time. The developed equipment is used for the practical use of the method for determining the neutron flux density, which will make it possible to it is necessary to consider the laws of spatial variation of the neutron field. These neutrons have energies of the order of several MeV. The angular distribution of the generated neutrons is almost isotropic. Works on the various configurations of moderators and reflectors for the neutron flux from the WWR-K reactor was carried out The developed methodology will allow us to obtain conclusions about the distribution of neutron flux in the building where the reactor is located, also the effect of neutron flux on the environment from a working WWR-K research reactor located near Almaty city.

Key words: neutrons, neutron counters, neutron detector, amplifier, neutron flux, WWR-K reactor.

Е.С. Мухамеджанов<sup>1</sup>\*, О.А. Каликулов<sup>1</sup>, С.К. Шинбулатов<sup>1</sup>, А.И. Жұмабаев<sup>1</sup>, Ш.Б. Утей<sup>1</sup>, Н.О. Ережеп<sup>1</sup>, А.Н. Седов<sup>1</sup>, У.С. Сәрсенбай<sup>1</sup>, А.Е. Бақтораз<sup>1</sup>, Н.О. Садуев<sup>2</sup> <sup>1</sup>Физика-техниклық институты, Қазақстан, Алматы қ. <sup>2</sup>Ресей ғылым академиясы П.Н. Лебедев атындағы физикалық институты, Ресей, Мәскеу қ. \*e-mail: y.mukhamejanov@gmail.com **ССР-Қ реакторынан нейтрондар ағынының тығыздығын анықтауға** 

#### ССР-Қ реакторынан неитрондар ағынының тығыздығын анықтауға арналған аппаратура мен әдістеме дайындау

Зерттеу реакторы-реакторда пайда болатын ядролық реакциялар нәтижесінде пайда болатын нейтрондық және гамма-сәулеленудің қуатты көзі болып табылады. Бұл мақалада СНМ – 18 типті нейтрон есептегіштерін қолдану ұсынылады. Тасымалданатын газ разрядты нейтрондық есептегіштердің көмегімен нейтрондық фонды тиімді өлшеу әдістемесін әзірлеу, сондай-ақ тіркеу жүйесін реттеу және дайындау, үлкен аумақты детекторлардың электрондық бөлігін әзірлеу ұсынылады.

Нақты уақыт режимінде ядролық реактордан нейтрондар ағынын сандық бағалауды үздіксіз автоматты, қашықтықтан және жедел айқындауға арналған аппаратура кешенін қамтитын автоматты жүйені құру. Әзірленген жабдық нейтрондар ағынының тығыздығын анықтау әдісін іс жүзінде пайдалану үшін қолданылады, бұл нейтрондар өрісінің кеңістіктік өзгеру заңдылықтарын ескеруге мүмкіндік береді. Бұл нейтрондарда бірнеше МэВ тәрізді энергияға ие және олардың бұрыштық таралуы іс жүзінде изотропты болып табылады. Әзірленген әдістеме реактор орналасқан ғимаратта нейтрондар ағынының таралуы, сондай-ақ осы ағындардың Алматы қаласының маңында орналасқан жұмыс істеп тұрған ССР-Қ зерттеу реакторынан қоршаған ортаға әсері туралы қорытынды жасауға мүмкіндік береді.[1]

**Түйін сөздер:** нейтрондар, нейтрондық санағыштар, нейтрондық детектор, күшейткіш, нейтрондар ағыны, ССР-Қ реакторы.

#### Введение

Промышленная деятельность человечества, в том числе и атомная, и тепловая энергетика, оказывает существенное техногенное воздействие на природную среду. В этой связи исследования воздействия потока нейтронов от реакторов на окружающую среду [2] являются крайне актуальными. Так как исследовательский реактор ВВР-К расположен вблизи города Алматы, то оценка влияния на окружающую среду потоков нейтронов становится особенно актуальной задачей.

В данной статье предлагается изучение взаимодействия нейтронов с веществом и определения особенностей их поглощения и отражения в различных водородосодержащих средах, таких как полиэтилен, графит, свинец, бериллий и т. д.[3,4].

Для регистрации нейтронов планируется создание экономичной и эргономичной аппаратуры. Установка, в отличие от LAND и KamLAND [5,6], состоит из газонаполненного пропорционального счетчика СНМ-18 и материалов для создания различных сред, таких как, полиэтилен, бор, графит, бериллий, свинец. Эксперимент будет проводиться в Институте ядерной физики при постоянном нейтронном фоне реактора BBP-К. Счетчики данного типа с успехом применяются для регистрации нейтронов.

#### Методика определения плотности потока нейтронов от реактора BBP-К

Для нейтронов с промежуточными энергиями непригоден метод регистрации по ядрам отдачи, так как ионизационный эффект довольно мал. Кроме того, в этой области энергий нет удобных ядерных реакций, которые сопровождались бы вылетом быстрых заряженных частиц. Поэтому для регистрации таких нейтронов с помощью борного нейтронного счетчика (в детекторах используют в качестве рабочего вещества трехфтористый бор – BF<sup>3</sup> так называемые борные счетчики), удобно сначала замедлить нейтроны до тепловой энергии с помощью замедлителя (так называемая термализация нейтронов).

Для тестирования в системы сбора данных для нейтронных счетчиков, в качестве замедлителя предполагается использовались легкие элементы (водород, бериллий, графит), в которых вероятность упругого рассеяния нейтронов для этой области энергий больше вероятности поглощения. Для этого детектор будет помещен в большой блок из парафина. Замедленные нейтроны в результате диффузии могут попасть в детектор, где и регистрируются. При расчете размеров замедлителя исходили из длины замедления – среднего расстояния по прямой от места попадания нейтрона в замедлитель до места, в котором нейтрон становится тепловым.[7]

Для регистрации нейтронов планируются использоваться детекторы тепловых нейтронов, окруженные водородосодержащими веществами (например, полиэтилен, парафин, борсодержащий полиэтилен) толщиной \* 25 мм и узел радиоэлектронного тракта, включающий предусилитель, основной усилитель, амплитудный дискриминатор-формирователь и автоматический выходной регистратор со встроенным таймером и регулируемым временем экспозиции. Кроме того, в работе будут применяться свинцовые, парафиновые, графитовые, полиэтиленовые и борполиэтиленовые мишени для тестирования действующего макета дистанционного измерителя.

Целью разработанной методики является определения плотности потока нейтронов от реактора BBP-K, основанной на учете ослабления потока нейтронов различными материалами и создание автоматической системы, включающей в себя комплекс аппаратуры для непрерывного автоматического, дистанционного и экспрессного определения количественной оценки потока нейтронов от ядерного реактора в режиме реального времени.

На данный момент измерение фона в реакторном зале проводятся стандартными методами, в основном измеряется гамма-фон, как наиболее проникающее излучение, в то время как меньшее внимание уделяется измерению нейтронных потоков. Нейтроны в реакторном зале обычно измеряются счетчиками типа БДМН-96. Нами предлагается использование счетчиков нейтронов типа СНМ-15, СНМ-18 и Гелий-2, которые имеют большую чувствительность в сравнении с БДМН-96[8,9].

Одним из существенных преимуществ предлагаемой методики, является возможность проведения измерений в режиме реального времени, в отличие от большинства существующих на сегодняшний день методик.

#### Разработка аппаратуры для автоматического измерения поток нейтронов от реактора ВВР-К нейтронными детекторами

При разработке аппаратуры для автоматического измерения потоков нейтронов от излучения реактора ВВР-К, определяющими критериями оптимизации являются потребляемая мощность, вес, габариты нейтронного детектора [10].

На основании проведенных экспериментальных исследований были определены наиболее оптимальные уровни питающих напряжений, а также определена конструкция аппаратуры для автоматического измерения нейтронных потоков от реактора [11,12]. Основные элементы конструкции детектора нейтронов, следующие:

- Блок водородсодержащего замедлителя;

- Элементы крепления детектора нейтронов (СНМ-18 или аналогичного);

- Конструкция узла усилителя и микроконтроллера для анализа сигнала от детектора;

- Конструкция узла для высоковольтного источника питания и передатчика сигналов.

Выполнена отладка используемого усилителя. В усилителе использованы оригинальные схемные решения, позволяющие добиться снижения потребляемой мощности. Его частотная характеристика была оптимизирована с целью получения максимального отношения сигнал/ шум (рисунок 1).

Была разработана высоковольтная плата питания для нейтронных счетчиков, ее принципиальная схема представлена на рисунке 2. Чтобы уменьшить общее энергопотребление электроники, было уменьшено высокое напряжение. Это привело к уменьшению сигнала от нейтронного счетчика, что потребовало увеличения усиления электроники. При высоком усилении тепловой шум электроники становится значительным – отношение сигнал/шум уменьшается. Чтобы улучшить его, необходимо уменьшить полосу пропускания усилителя. Это может быть настроено, поскольку спектральная плотность шума приблизительно постоянна, и спектральная плотность сигнала увеличивается в низкочастотной области, и потому что в этой реализации сигнал может быть описан интегралом дельтаимпульса. Поскольку расчетная скорость счета нейтронов была ниже 1 в секунду, полоса частот была выбрана в области 100 Гц.



Рисунок 1 – Принципиальная схема используемого усилителя



Рисунок 2 – Принципиальная схема источника высокого напряжения

Были смонтированы и установлены на посадочные места, основные узлы подключения и передача сигналов с аппаратуры для автоматического измерения потоков нейтронов с реактора BBP-К. В частности, были установлены платы высоковольтного питания и платы съема информации для аппаратуры. Для быстрой передачи сигналов использовали разъем USB 2.0 (Рисунок 3).



**Рисунок 3** – Основные узлы подключения и передача сигналов с разрабатываемой аппаратуры для автоматического измерения потоков нейтронов

Работа выполнена при поддержке гранта Комитета науки министерства образования и науки РК ИРН АР08857359 «Измерение потоков нейтронов от реактора BBP-К нейтронными детекторами большой площади для оценки влияния на окружающую среду».

#### Литература

1 Saduev N.O., Kalikulov O.A., Shepetov A.L., Mukhamejanov Y.S., Yerezhep N.O., Shinbulatov S.K., Zhumabayev A.I., Utey Sh., Baktoraz A.E. Experimental studies of cosmic rayus at the laboratory of cosmic rays variations of al-Farabi Kazakh National University // INDC International Nuclear Data Comitte, Proceedings of the Tenth AASPP Workshop on Asian Nuclear Reaction Database Development. – 2019. Almaty, Kazakhstan

2 Brovchenko M., Duhamel I., Dechenaux B. Neutron-gamma flux and dose calculations for feasibility study of DISCOMS instrumentation in case of severe accident in a GEN 3 reactor // EPJ Web of Conferences 153, 2017. – 07030 (1-6).

З Чубенко А.П., Щепетов А.Л., Оскомов В.В., Садыков Т.Х., Байгубеков А.С., Жунусбеков М.К., Застрожнова Н.Н. и др. Исследование нейтронной компоненты космических лучей на высоте 1750 м над уровнем моря // Материалы 30-й Всероссийской конференции по космическим лучам. – 2008. – С 62.

4 Shepetov A., Chubenko A., Kryakunova O., Kalikulov O., Mamina S., Mukashev K., Nam R., Piscal V., Ryabov V., Saduyev N., Sadykov T., Salikhov N., Tautaev E., Vil'danova L., Zhantayev Zh., and Zhukov V. Underground neutron events at Tien Shan // IOP Journal of Physics: Conf. Series 1181. – 2019. – P. 012017.

5 Blaich Th., Elze Th.W., Emling H., Freiesleben H., Grimm K., Henning W., Holzmann R., Ickert G., Keller J.G., Klingler H., Kneissl W., König R., Kulessa R., Kratz J.V., Lambrecht D., Lange J.S., Leifels X., Lubkiewicz E., Proft M., Prokopowicz W., Schütter C., Schmidt R., Spies H., Stelzer K., Stroth J., Walus W., Wajda E., Wollersheim H.J., Zinser M., Zude E. LAND Collaboration A large area detector for high-energy neutrons // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A. – 1992. – P.136-154.

6 Kozlov A., Chernyak D. A large area detector for thermal neutron flux measurements at the KamLAND site // Nuclear Inst. and Methods in Physics Research, A. – 2018. – P.162-169.

7 Yerezhep N., Trzaska W.H., Bezrukov L., Enqvist T., Kuusiniemi P., Inzhechik L., Joutsenvaara J., Loo K., Lubsandorzhiev B., Slupecki M., Saduyev N.O., Baktoraz A., Mukhamejanov Y. Underground investigation of extensive air showers spectra at high energy range of cosmic rays and other research in the pyhäsalmi mine // Recent Contributions to Physics. – 2020. – Vol 72 – No 1 – Page 19-26.

8 Shaulov S.B., Saduyev N.O., Kalikulov O.A., Zhukov V.V., Ryabov V.A., Shepetov A.L., Vil'danova V.I., Muhkamejanov E.S., Yerezhep N.O., Shinbulatov S.K., Utey Sh.B. Autonomous station for recording radiation in a thunderstorm atmosphere at the Tien Shan high mountain cosmic-ray station // Recent Contributions to Physics. -2019. -N (70) -C. 84-98.

9 Shaulov S.B., Saduyev N.O., Beznosko D., Kalikulov O.A., Zhukov V.V., Ryabov V.A., Shepetov A.L., Piskal V.V., Muhkamejanov E.S., Shinbulatov S.K., Zhumabayev A.I., Utey Sh.B., Yerezhep N.O. Method for determining angles in X-ray emulsion chambers // Recent Contributions to Physics. -2019. - N 2 (69) - C. 61-70.

10 N.O. Sadyev, O.A. Kalikulov, A.N. Sedov, Y.S. Mukhamejanov, V.V. Oskomov, S.K.Shinbulatov, N.O.Yerezhep, Sh.B.Utey, A.Y. Baktoraz Development of an automated system for the determination of the snow water equipment and soil moisture by the neutron component of cosmic rays // Acta Physica Polonica B. – 2020. –Vol. 51, –No. 3, – P. 887-892.

11 Оскомов В. В., Седов А. Н., Садуев Н. О., Каликулов О. А., Мендибаев К. О., Жумабаев А. И., Мухамеджанов Е. С., Искаков Б. А., Байгарашев Д. М., Таутаев Е. М., Кенжина И. Е. Микромощные узлы радиоэлектронного тракта нейтронного детектора // Известия НАН РК, Серия физико-математическая 2(294). – 2014. – С. 69-73.

12 Oskomov V., Sedov A., Saduyev N., Kalikulov O., Kenzhina I., Tautaev E., Mukhamejanov Y., Dyachkov V., Utey Sh. Data collection system for a wide range of gas-discharge proportional neutron counters // IOP Conf. Series: Journal of Physics: Conf. Series 936. – 2017. – P. 012047 (1-5).

#### References

1 N.O. Saduev, et al, INDC International Nuclear Data Comitte, Proceedings of the Tenth AASPP Workshop on Asian Nuclear Reaction Database Development. – 2019. Almaty, Kazakhstan (2019).

2 M. Brovchenko et al., Neutron-gamma flux and dose calculations for feasibility study of DISCOMS instrumentation in case of severe accident in a GEN 3 reactor, EPJ Web of Conferences 153, 07030 (2017).

3 A.P. Chubenko, i dr. Materialy 30-y Vserossiyskoy konferentsii po kosmicheskim lucham, 62 (2008). (in Russ).)

4 A. Shepetov et al, Underground neutron events at Tien Shan, IOP Journal of Physics: Conf. Series 1181, 012017 (2019)

5 Blaich et al., Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A, 136-154 (1992).

6 A. Kozlov et al., Nuclear Inst. and Methods in Physics Research A, 162-169 (2018).

7 N. Yerezhep, Recent Contributions to Physics, 72 (1), 19-26 (2020).

8 N.O. Sadyev et al., Acta Physica Polonica B, 51 (3), 887-892 (2020).

9 S.B. Shaulov et al., Recent Contributions to Physics, 3 (70), 84-98 (2019).

10 S.B. Shaulov et al., Recent Contributions to Physics ,2 (69), 61-70 (2019).

11 V.V. Oskomov et al., News NAS RK, Phys. Math. 294, 69 (2014). (in Russ).

12 V.V. Oskomov et al., Data collection system for a wide range of gas-discharge proportional neutron counters, J. Phys.: Conf. Ser. 936, 012047 (2017).

## 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
Джунушалиев В., Тлемисов А., Фоломеев В. Глюонные трубки в неабелевой теории Пр	3. рока + скалярное поле Хиггса	
2-бөлім Плазма физикасы	Section 2 Plasma Physics	Раздел 2 Физика плазмы
Cistakov K., Christ P., Manganelli L., Gavril Study on a dense theta pinch plasma for ion	in R., Khurchiev A., Savin S., Iberler M., Jac beam stripping application for FAIR	<i>coby J.</i>
<i>Сламия М., Досболаев М.Қ.</i> Мыс нанобөлшектерінің жоғары жиілікті	сыйымдылықты разряд плазмасының жа	рық интенсивтілігіне әсері 22
Ramazanov T.S., Kodanova S.K., Issanova M. Temperature anisotropy relaxation processes	I.K., Orazbayev S.A., Yelubaev D.Ye. in dense plasma	
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
Жантуаров С.Р., Омарова Ж.Б., Жапар А. Карни М.Дж., Токмолдин Н.С. Изготовление и анализ производительнос	Б., Шонгалова А.К., Чучвага Н.А., Жолдь ги при деградации перовскитных солнечн	ибаев К.С., Аймаганбетов К.П., ных элементов
<i>Мұсабек Г.Қ., Қалимолдаев М.Н., Лысенко</i> Медициналық қолданыстарға арналған ке жетістіктер	э В., Диханбаев К.К., Байганатова Ш.Б., 2 уекті титан құрылымдарын алудың әдісте	А <i>мирханова Г.А.</i> рін дамыту жолындағы заманауи 
4-бөлім Жылу физикасы және теориялық жылу техникасы	Section 4 Thermal Physics and Theoretical Thermal Engineering	Раздел 4 Теплофизика и теоретическая теплотехника
Askarova A., Bolegenova S., Messerle V., Bo. Investigation of the liquid fuel single-hole in	legenova S., Ospanova Sh., Bodykbayeva M. jection in the combustion chamber	
Карпенко Е.И., Устименко А.Б. Плазменные методы повышения эффектии	вности использования твердых топлив	
5-бөлім Бейсызық физика. Радиофизика	Section 5 Nonlinear physics. Radiophysics	Раздел 5 Нелинейная физика. Радиофизика
Жексебай Д.М., Хохлов С.А., Кожагулов Е Прогнозирование параметров и классифи	. <i>Т.</i> кация молекулярных оттоков с помощью	сверточных нейронных сетей
Мухамеджанов Е.С., Каликулов О.А., Шин Сәрсенбай У.С., Бақтораз А.Е., Садуев Н. Разработка методики и аппаратуры для из	ибулатов С.К., Жумабаев А.И., Утей Ш.Е О. мерения плотности потока нейтронов от р	Б., Ережеп Н.О., Седов А.Н., реактора ВВР-К96