

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

№2 (81)

Алматы
«Қазақ университеті»
2022



ISSN 1563-0315; eISSN 2663-2276

ХАБАРШЫ

ФИЗИКА СЕРИЯСЫ №2 (81) маусым



04.05.2017 ж. Қазақстан Республикасының Ақпарат және коммуникация министрлігінде тіркелген

Қуәлік № 14498-Ж

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

ЖАУАПТЫ ХАТШЫ

Иманбаева А.К., ф.-м.ғ.к. (Қазақстан)

Телефон: +7(727) 377-33-46

E-mail: physicskaz@gmail.com

РЕДАКЦИЯ АЛҚАСЫ:

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

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

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

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

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

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.



Жоба менеджері

Гульмира Шаққозова

Телефон: +7 701 724 2911

E-mail: Gulmira.Shakkozova@kaznu.kz

Пішімі 60x84/8. Көлемі 8,0 б.т.

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

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

«Қазақ университеті» баспа үйінің баспаханасында басылды.

Авторлық редакциямен жарыққа шықты

© Әл-Фараби атындағы ҚазҰУ, 2022

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**

IRSTI 29.05.49

<https://doi.org/10.26577/RCPH.2022.v81.i2.01>V. Dzhunushaliev^{1,2,3*}, V. Folomeev^{1,3,4†}, A. Abdykaliyeva²,S. Khussainova², A. Temirova²¹Institute of Nuclear Physics, Kazakhstan, Almaty²Al-Farabi Kazakh National University, Kazakhstan, Almaty³Acad. J. Jeenbaev Institute of Physics of the NAS of the Kyrgyz Republic, Kyrgyzstan, Bishkek⁴Laboratory for Theoretical Cosmology, International Centre of Gravity and Cosmos, Tomsk State University of Control Systems and Radioelectronics (TUSUR), Russia, Tomsk

*email: v.dzhunushaliev@gmail.com, †email: vfolomeev@mail.ru

MASS GAP FOR A MONOPOLE INTERACTING WITH DIFFERENT NONLINEAR SPINOR FIELDS

We study the properties of the mass gap for monopole solutions in SU(2) Yang-Mills theory with a source of the non-Abelian gauge field in the form of a spinor field described by the nonlinear Dirac equation. Different types of nonlinearities parameterized by the parameter λ are under consideration. It is shown that for the range of values of this parameter studied in the present paper the value of the mass gap depends monotonically on this parameter, and the position of the mass gap does not practically depend on λ .

In the present paper, we study the dependence of the size of a mass gap, its position, etc., on the value of a parameter describing the nonlinear self-interaction potential of the spinor field.

By the term a position of the mass gap, we mean the value of the frequency \tilde{E}_Δ , for which the energy spectrum has a minimum. It is of interest to note that the position of the mass gap \tilde{E}_Δ , does not practically depend on the nonlinearity parameter λ . One can assume that in fact this is the case, and deviations from this value are related to errors in numerical calculations. It is of interest that the position of the mass gap does not practically depend on the value of the nonlinearity parameter, at least in the range of values of the spinor field nonlinearity parameter considered here.

Key words: non-Abelian SU(2) theory; nonlinear Dirac equation; monopole; energy spectrum; mass gap; nonlinearity parameter.

V. Джунушалиев^{1,2,3*}, В. Фоломеев^{1,3,4†}, А. Абдықалиева²,
С. Хусайнова², А. Темірова²¹Ядролық физика институты, Қазақстан, Алматы қ.²Әл-Фараби ат. Қазақ ұлттық университеті, Қазақстан, Алматы қ.³ҚР ҰҒА Акад. Ж. Жеенбаев ат. физика институты, Қырғызстан, Бішкек қ.⁴Теориялық космология зертханасы, гравитация және ғарыш халықаралық орталығы, Томск мемлекеттік басқару жүйелері және радиоэлектроника университеті, Ресей, Томск қ.

*email: v.dzhunushaliev@gmail.com, †email: vfolomeev@mail.ru

Әртүрлі сызықты емес спинорлық өрістермен өзара әрекеттесетін монополь үшін массалық саңылау

Жұмыста Янг-Миллс теориясының SU(2) монополиялық шешімдері үшін массалық саңылаудың қасиеттерін абелдік емес калибрлік өрісінің көзі Дирак сызықты емес теңдеуімен сипатталған спинорлық өріс түрінде зерттелген. λ параметрімен сипатталатын сызықтық емес әр түрлі типтер қарастырылды. Орындалған жұмыста зерттелген параметрдің мәндер ауқымы үшін массалық саңылау мөлшері монотонды түрде λ параметрге тәуелді, ал массалық саңылау орны іс жүзінде λ -ға тәуелді емес екендігі көрсетілген. Жұмыста біз массалық саңылаудың шамасының тәуелділігін, оның орнын және т. б. зерттейміз. сызықтық емес потенциалды сипаттайтын параметр мәнінен кері өрістегі өзара әрекеттесу. Массалық саңылаудың позициясы термині ретінде біз \tilde{E}_Δ жиілігінің мәнін түсінеміз, ол үшін энергия спектрінің минимумы болады. Бір қызығы, \tilde{E}_Δ массалық алшақтықтың жағдайы сызықтық емес λ

параметріне байланысты емес. Бұл шынымен де солай деп болжауға болады, және бұл мәннен ауытқу сандық есептеулердегі қателіктермен байланысты. Нәтеже жүзінде массалық саңылаудың орны іс жүзінде сызықтық емес параметрдің шамасына тәуелді емес, кем дегенде осы жерде қарастырылған спинорлық өрістің сызықтық емес параметр мәндерінің диапазонында.

Түйін сөздер: Абелдік емес $SU(2)$ теория; Дирактың сызықты емес теңдеуі; монополия; энергетикалық спектр; массалық саңылау; сызықтық емес параметр

В. Джунушалиев^{1,2,3*}, В. Фоломеев^{1,3,4†}, А. Абдыкалиева²,
С. Хусайнова², А. Темирова²

¹Институт ядерной физики, Казахстан, г. Алматы

²Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Казахстан, г. Алматы

³Институт физики им. Акад. Ж. Жеенбаева НАН Кыргызской Республики, Киргизия, г. Бишкек

⁴Лаборатория теоретической космологии, Международный центр гравитации и космоса, Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники (ТУСУР), Россия, г. Томск

*email: v.dzhunushaliev@gmail.com, †email: vfolomeev@mail.ru

Массовая щель для монополя, взаимодействующего с различными нелинейными спинорными полями

Мы изучаем свойства массового разрыва для монополярных решений в $SU(2)$ теории Янга-Миллса с источником неабелева калибровочного поля в виде спинорного поля, описываемого нелинейным уравнением Дирака. Рассматриваются различные типы нелинейностей, характеризующиеся параметром λ . Показано, что для изучаемого в настоящей работе диапазона значений этого параметра величина массового разрыва монотонно зависит от этого параметра, а положение массового разрыва практически не зависит от λ . В настоящей работе мы исследуем зависимость величины массового зазора, его положения и т.д. от значения параметра, описывающего нелинейный потенциал самодействия в спинорном поле. Под термином положение массовой щели мы понимаем значение частоты \tilde{E}_Δ , для которой энергетический спектр имеет минимум. Интересно отметить, что положение массовой щели \tilde{E}_Δ практически не зависит от параметра нелинейности λ . Можно предположить, что это действительно так, а отклонения от этого значения связаны с ошибками в численных расчетах. Примечательно, что положение массового зазора практически не зависит от величины параметра нелинейности, по крайней мере, в рассматриваемом здесь диапазоне значений параметра нелинейности спинорного поля.

Ключевые слова: Неабелева $SU(2)$ теория; нелинейное уравнение Дирака; монополь; энергетический спектр; массовая щель; параметр нелинейности.

Introduction

The problem of a mass gap occupies a special place in quantum chromodynamics. The significance of this problem is related to the fact that its solution requires the development of nonperturbative quantization methods in field theory, which are absent at present. It should be emphasised that the nonperturbative quantization is carried out numerically in lattice calculations. However, such calculations do not enable one to have a full understanding of the nonperturbative quantization, and some questions of principle still remain to be clarified: What are the properties of operators of a strongly interacting field? How one can determine a quantum state of such a field? Also, there are many other unclear questions for which there are answers in

the case of perturbative quantization using Feynman diagrams.

In this connection, the question arises as to the existence of a mass gap in other theories. The presence of a mass gap in any theory is of interest by itself, but it is also possible that such a theory may serve as some approximate description of nonperturbative effects in quantum theory involving a strong interaction. In Refs. [1, 2], it is shown that in $SU(2)$ gauge theory with a source in the form of a nonlinear spinor field, there exist topologically trivial solutions with a radial magnetic field (“monopoles”). Such “monopoles” possess the following features: (a) the radial field decreases as r^{-3} at infinity (this is the reason why we use quotation marks for the word monopole); (b) the solutions are topologically trivial, unlike those describing the 't Hooft-Polyakov

monopole; (c) the most interesting fact is that the energy spectrum of such solutions has an absolute minimum, which we can refer to as a mass gap.

In the absence of a SU(2) gauge field, the corresponding mass gap was found in Refs. [3, 4] in studying a nonlinear spinor field. These references also consider a generalization of nonlinear spinor field when one introduces some constant in the nonlinear term for the spinor field. In the present paper we study effects of the presence of a mass gap and its properties in a system containing such a nonlinear spinor field.

The nonlinear Dirac equation was introduced by W. Heisenberg as an equation describing the properties of an electron. The classical properties of this equation, in particular, its soliton-like solutions, were investigated in Refs. [3, 4]. Subsequently one of variants of the nonlinear Dirac equation was employed for an approximate description of the

properties of hadrons (this approach is called the Nambu-Jona-Lasinio model [5]; for a review, see Ref. [6]).

In the present paper we study the dependence of the size of a mass gap, its position, etc., on the value of a parameter describing the nonlinear self-interaction potential of the spinor field.

Methods

Equations and Ansätze for Yang-Mills fields coupled to a nonlinear Dirac field

In this section we closely follow Ref. [1, 2]. The Lagrangian describing a system consisting of a non-Abelian SU(2) field A_μ^a interacting with nonlinear spinor field ψ can be taken in the form

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}^a F^{a\mu\nu} + i\hbar c \bar{\psi} \gamma^\mu D_\mu \psi - m_f c^2 \bar{\psi} \psi + \frac{\Lambda}{2} g \hbar c V(\bar{\psi}, \psi). \quad (1)$$

Here m_f is the mass of the spinor field; $D_\mu = \partial_\mu - i\frac{g}{2}\sigma^a A_\mu^a$ is the gauge-covariant derivative, where g is the coupling constant and σ^a are the SU(2) generators (the Pauli matrices); $F_{\mu\nu}^a = \partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a + g\varepsilon_{abc}A_\mu^b A_\nu^c$ is the field strength tensor for the SU(2) field, where ε_{abc} (the completely antisymmetric Levi-Civita symbol) are the SU(2) structure constants; Λ is a constant; γ^μ are the Dirac matrices in the standard representation; $a, b, c = 1, 2, 3$ are color indices and $\mu, \nu = 0, 1, 2, 3$ are spacetime indices; $V(\bar{\psi}, \psi)$ is the potential describing the

nonlinear self-interaction of the spinor field ψ . According to Ref. [4], this potential is a linear combination of scalar and pseudoscalar interactions:

$$V(\bar{\psi}, \psi) = \alpha(\bar{\psi}\psi)^2 + \beta(\bar{\psi}\gamma^5\psi)^2 \quad (2)$$

where α and β are constants.

Our purpose is to study monopole-like solutions of these equations. To do this, we use the standard SU(2) monopole *Ansatz*

$$A_i^a = \frac{1}{g} [1 - f(r)] \begin{pmatrix} 0 & \sin\varphi & \sin\theta\cos\theta\cos\varphi \\ 0 & -\cos\varphi & \sin\theta\cos\theta\sin\varphi \\ 0 & 0 & -\sin^2\theta \end{pmatrix}, \quad i = r, \theta, \varphi (\text{in polar coordinates}), \quad (3)$$

$$A_t^a = 0 \quad (4)$$

and the *Ansatz* for the spinor field from Refs. [7, 8]

$$\psi^T = \frac{e^{-i\frac{Et}{\hbar}}}{gr\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ -u \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} u \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} iv\sin\theta e^{-i\varphi} \\ -iv\cos\theta \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -iv\cos\theta \\ -iv\sin\theta e^{i\varphi} \end{pmatrix} \quad (5)$$

where E/\hbar is the spinor frequency and the functions u and v depend on the radial coordinate r only.

We will seek a solution to the Euler-Lagrange equations coming from the variation of the Lagrangian (1). Substituting in these equations the *Ansatz* (3)-(5), the expression (2), and integrating over the angles θ, φ (for details see Ref. [4]), the resulting equations for the unknown functions f, u , and v are

$$-f'' + \frac{f(f^2-1)}{x^2} + \tilde{g}_\Lambda^2 \frac{\tilde{u}\tilde{v}}{x} = 0, \quad (6)$$

$$\tilde{v}' + \frac{f\tilde{v}}{x} = \tilde{u} \left(-1 + \tilde{E} + \frac{\tilde{u}^2 - \lambda\tilde{v}^2}{x^2} \right), \quad (7)$$

$$\tilde{u}' - \frac{f\tilde{u}}{x} = \tilde{v} \left(-1 - \tilde{E} + \frac{\tilde{u}^2 - \lambda\tilde{v}^2}{x^2} \right). \quad (8)$$

Here, for convenience of making numerical calculations, we have introduced the following dimensionless variables: $x = r/\lambda_c$, $\tilde{u} = u\sqrt{\Lambda/\lambda_c g}$, $\tilde{v} = v\sqrt{\Lambda/\lambda_c g}$, $\tilde{E} = \lambda_c E/(\hbar c)$, $\tilde{g}_\Lambda^2 = g\hbar c\lambda_c^2/\Lambda$, where $\lambda_c = \hbar/(m_f c)$ is the Compton

wavelength and λ is some combination of the constants α, β . The prime denotes differentiation with respect to x .

The total energy density of the monopole under consideration is

$$\tilde{\varepsilon} = \tilde{\varepsilon}_m + \tilde{\varepsilon}_s = \frac{1}{\tilde{g}_\Lambda^2} \left[\frac{f'^2}{x^2} + \frac{(f^2 - 1)^2}{2x^4} \right] + \left[\tilde{E} \frac{\tilde{u}^2 + \tilde{v}^2}{x^2} + \frac{(\tilde{u}^2 - \lambda \tilde{v}^2)^2}{2x^4} \right]. \quad (9)$$

Here the expressions in the square brackets correspond to the dimensionless energy densities of the non-Abelian gauge fields, $\tilde{\varepsilon}_m \equiv \frac{\lambda_c^4 g^2}{\tilde{g}_\Lambda^2} \varepsilon_m$, and of the spinor field, $\tilde{\varepsilon}_s \equiv \frac{\lambda_c^4 g^2}{\tilde{g}_\Lambda^2} \varepsilon_s$.

Correspondingly, the total energy of the monopole is calculated using the formula

$$\begin{aligned} \tilde{W}_t &\equiv \frac{\lambda_c g^2}{\tilde{g}_\Lambda^2} W_t = 4\pi \int_0^\infty x^2 \tilde{\varepsilon} dx = \\ &= (\tilde{W}_t)_m + (\tilde{W}_t)_s \end{aligned} \quad (10)$$

where the energy density $\tilde{\varepsilon}$ is taken from Eq. (9), and it is the sum of the energies of the magnetic field and the nonlinear spinor field.

Numerical results and Discussion

Numerical integration of Eqs. (6)-(8) is carried out using the shooting method with the boundary conditions given for $x = \delta \ll 1$ (for details see Refs. [1, 2]):

$$\begin{aligned} f(\delta) &= 1 + \frac{f_2}{2} \delta^2, \\ f'(\delta) &= f_2 \delta, \quad \tilde{u}(\delta) = \tilde{u}_1 \delta, \quad (11) \\ \tilde{v}(\delta) &= \frac{\tilde{v}_2}{2} \delta^2. \end{aligned}$$

The value of the parameter \tilde{v}_2 can be found from Eqs. (6)-(8), $\tilde{v}_2 = 2\tilde{u}_1(\tilde{E} - 1 + \tilde{\lambda}\tilde{u}_1^2)/3$. Adjusting the values of the parameters f_2, \tilde{u}_1 , one can find the required regular solutions.

Our purpose is to construct a spectrum of solutions for different values of λ . To do this, we find regular solutions for different values of the frequency \tilde{E} with a fixed value of the parameter λ . For every value of \tilde{E} , we calculate the total energy \tilde{W}_t given by the expression (10). Then we construct the dependence $\tilde{W}_t(\tilde{E})$, using which it is possible to find a mass gap as a minimum of the function $\tilde{W}_t(\tilde{E})$. Such a procedure is repeated for different values of the parameter λ . In the present study we investigate the

dependence of the value of the mass gap $\Delta(\lambda)$ on the parameter λ . Also, we study the dependence $\tilde{E}_\Delta(\lambda)$ on the same parameter, where the quantity \tilde{E}_Δ is defined as the value of the frequency \tilde{E} for which the energy spectrum has a minimum, i.e., it is the position of the mass gap on the axis \tilde{E} .

The typical solution of the equations (6)-(8) is given in Fig. 1, where the profiles of the functions $f(x), \tilde{v}(x)$, and $\tilde{u}(x)$ are given. Fig. 2 shows the typical distribution of the energy density (9), as well as the profiles of the physical components of the color magnetic fields H_i^a defined as $H_i^a = -(1/2)\sqrt{\gamma} \varepsilon_{ijk} F^{ajk}$, where i, j, k are space indices and γ is the determinant of the spatial metric. This gives the components

$$H_r^a \sim \frac{1 - f^2}{gr^2}, \quad (12)$$

$$H_\theta^a \sim \frac{1}{g} f', \quad (13)$$

$$H_\phi^b \sim \frac{1}{g} f' \quad (14)$$

where $a = 1, 2, 3$ and we have dropped the dependence on the angular variables. In these figures, we use quotation marks for the term ‘‘monopole’’ since the asymptotic behavior of the radial magnetic field $H_r^a \sim r^{-3}$ differs from that of the 't Hooft-Polyakov monopole, for which $H_r^a \sim r^{-2}$.

Fig. 3 shows the dependence of the energy spectrum $\tilde{W}_t(\tilde{E})$ on the parameter λ . From this figure, one can conclude that when λ increases, the energy spectrum rises, that is the corresponding values of the energy \tilde{W}_t incr.

Our main purpose here is to study the dependence of the value of the mass gap Δ on the nonlinearity parameter λ characterizing the properties of the nonlinear potential of the spinor field ψ .

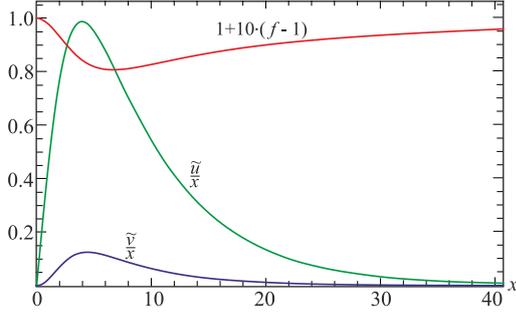


Figure 1 – The typical behavior of the functions f , \tilde{u} , and \tilde{v} of the “monopole” solution for $\tilde{g}_\Lambda = 0.3354$, $\lambda = 0.8$, $\tilde{E} = 0.99$, $f_2 = -0.0042694$, $u_1 = 0.46657$

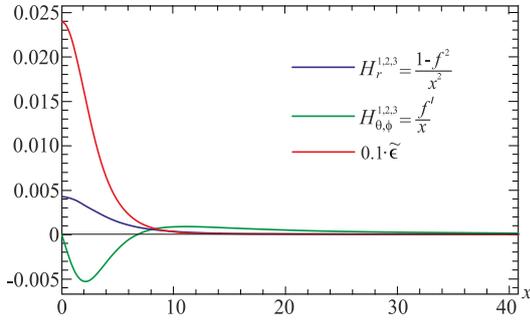


Figure 2 – The typical behavior of the magnetic fields \tilde{H}_r , $\tilde{H}_{\phi,\theta}$ given by Eqs. (12)-(14) and the energy density $\tilde{\epsilon}$ from Eq. (9) of the “monopole” solution for $\tilde{g}_\Lambda = 0.3354$, $\lambda = 0.8$, $\tilde{E} = 0.99$, $f_2 = -0.0042694$, $u_1 = 0.46657$

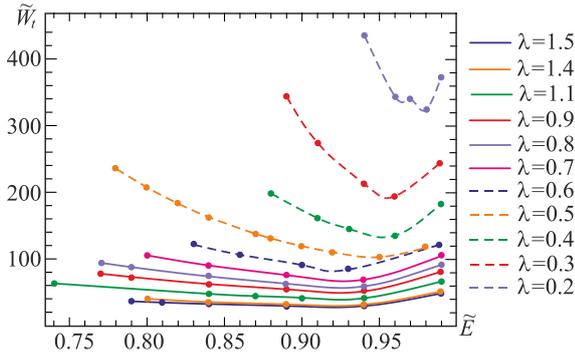


Figure 3 – The energy spectra of the “monopole” solutions for different values of the nonlinearity parameter λ

The corresponding results of computations are given in Fig. 4. In turn, Fig. 5 shows the dependence of the position of the mass gap on the nonlinearity parameter λ . By the term a position of the mass gap, we mean the value of the frequency \tilde{E}_Δ for which the energy spectrum has a minimum. It is of interest to note that the position of the mass gap \tilde{E}_Δ does not

practically depend on the nonlinearity parameter λ . One can assume that in fact this is the case, and deviations from this value are related to errors in numerical calculations.

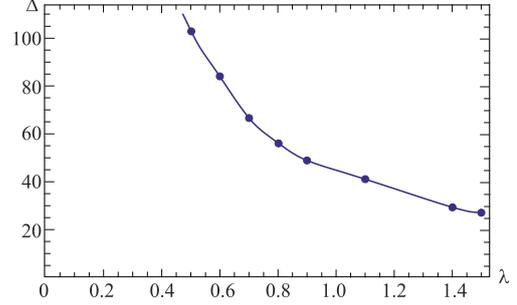


Figure 4 – The dependence of the mass gap Δ on the nonlinearity parameter λ

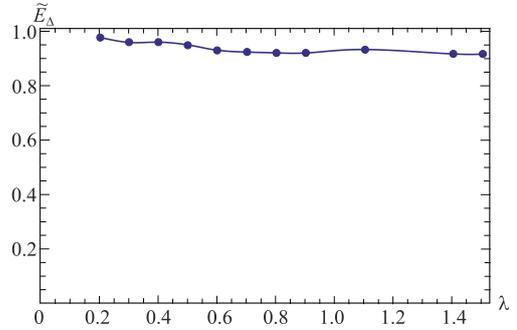


Figure 5 – The dependence of the position of the mass gap \tilde{E}_Δ on the nonlinearity parameter λ

Conclusions

In the present paper we have studied the dependence of the value of the mass gap and its position on the parameter describing the nonlinearity of the spinor field in the Dirac equation. We have found out that the value of the mass gap, which is assumed to be a global minimum of the energy spectrum of the “monopole” solution in SU(2) Yang-Mills theory with a source in the form of a nonlinear spinor field, depends smoothly on the nonlinearity parameter of the spinor field. We use the word “monopole” in quotation marks because the magnetic field decreases asymptotically as r^{-3} , unlike the 't Hooft-Polyakov monopole solution where the magnetic field decreases according to the Coulomb law: r^{-2} . It is of interest that the position of the mass gap does not practically depend on the value of the nonlinearity parameter, at least in the range of values of the spinor field nonlinearity parameter considered here.

Thus, the study indicates that the mass gap in SU(2) Yang-Mills theory with a source in the form of

a nonlinear spinor field does exist for different types of nonlinearity and depends smoothly on the nonlinearity parameter.

Acknowledgements

The work was supported by the program No. BR10965191 (Complex Research in Nuclear and

Radiation Physics, High Energy Physics and Cosmology for the Development of Competitive Technologies) of the Ministry of Education and Science of the Republic of Kazakhstan. We are also grateful to the Research Group Linkage Programme of the Alexander von Humboldt Foundation for the support of this research.

References

- 1 Dzhunushaliev V., Folomeev V., and Serikbolova A. Monopole solutions in SU(2) Yang-Mills-plus-massive-nonlinear-spinor-field theory //Phys. Lett. B. – 2020. – Vol.806. – ArtNo 135480.
- 2 Dzhunushaliev V., Burtebayev N., Folomeev V.N., Kunz J., Serikbolova A. and Tlemisov A. Mass gap for a monopole interacting with a nonlinear spinor field //Phys. Rev. D. – 2021. – Vol.104, no.5. – P.6.
- 3 Finkelstein R., LeLevier R., and Ruderman M. Nonlinear Spinor Fields //Phys. Rev. – 1951. – Vol.83, Iss. 2. – P.326.
- 4 Finkelstein R., Fronsdal C., and Kaus P. Nonlinear Spinor Field //Phys. Rev. – 1956. – Vol.103, Iss. 5. – P.1571.
- 5 Nambu Y. and Jona-Lasinio G. Dynamical Model of Elementary Particles Based on an Analogy with Superconductivity. 1. //Phys. Rev. – 1961. – Vol.122. – P.345.
- 6 Klevansky S.P. The Nambu-Jona-Lasinio model of quantum chromodynamics //Rev. Mod. Phys. – 1992. – Vol.64. – P.649.
- 7 Li X. z., Wang K. l., and Zhang J. z. Light Spinor Monopole //Nuovo Cim. A. – 1983. – Vol.75. – P.87.
- 8 Wang K.L. and Zhang J.Z. The Problem of Existence for the Fermion-Dyon Selfconsistent Coupling System in a SU(2) Gauge Model //Nuovo Cim. A. – 1985. – Vol.86. – P.32.

References

- 1 V. Dzhunushaliev, V. Folomeev, and A. Serikbolova, Monopole solutions in SU(2) Yang-Mills-plus-massive-nonlinear-spinor-field theory, Phys. Lett. B 806, 135480 (2020).
- 2 V. Dzhunushaliev, N. Burtebayev, V. N. Folomeev, J. Kunz, A. Serikbolova and A. Tlemisov, Mass gap for a monopole interacting with a nonlinear spinor field, Phys. Rev. D 104 (5), 6 (2021).
- 3 R. Finkelstein, R. LeLevier, and M. Ruderman, Nonlinear Spinor Fields, Phys. Rev. 83 (2), 326 (1951).
- 4 R. Finkelstein, C. Fronsdal, and P. Kaus, Nonlinear Spinor Field, Phys. Rev. 103 (5), 1571 (1956).
- 5 Y. Nambu and G. Jona-Lasinio, Dynamical Model of Elementary Particles Based on an Analogy with Superconductivity. 1., Phys. Rev. 122, 345 (1961).
- 6 S.P. Klevansky, The Nambu-Jona-Lasinio model of quantum chromodynamics, Rev. Mod. Phys. 64, 649 (1992).
- 7 X. z. Li, K. l. Wang, and J. z. Zhang, Light Spinor Monopole, Nuovo Cim. A 75, 87 (1983).
- 8 K.L. Wang and J.Z. Zhang, The Problem of Existence for the Fermion-Dyon Selfconsistent Coupling System in a SU(2) Gauge Model, Nuovo Cim. A 86, 32 (1985).

А.Н. Бимуханов*, , А.А. Алдонгаров 

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

*e-mail: Bimukhanov.92@gmail.com

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ ПЕРЕНОСА ЗАРЯДА КОМПЛЕКСА Si(DPP)₂

В данной статье приведены данные по исследованию расчетов переноса заряда, энергии реорганизации, интеграла межмолекулярного переноса, скорости переноса для оптимизированной структуры нового нейтрального шестикоординационного кремниевого комплекса Si(DPP)₂. Представлены основные расчетные и экспериментальные геометрические данные по оптимизированной структуре. Комплекс имеет искаженную октаэдрическую геометрию с усреднением коротких длин связей Si-N: расчетная – 1,958365 Å и экспериментальная – 1,9111 Å. Структура Si(DPP)₂ содержит два дифенилпиридин (DPP = 2,6-diphenylpyridine ligand) лиганда. Оптимизация, вычислительные расчеты необходимых данных для нахождения свойств переноса заряда были выполнены с использованием функционала – B3LYP и базисного набора – 6-31G*. Геометрические параметры для оптимизации структуры, были получены из недавних, известных, экспериментальных данных. Было выполнено сравнение полученных теоретических данных переноса заряда исследуемой структуры Si(DPP)₂, с известными экспериментальными данными. На основании сравнения экспериментальных данных с полученными результатами компьютерных вычислений, последние показали близкие результаты к первым. Эта работа показывает, что вычислительные методы могут помочь в дальнейшем изучении будущих структур, а также в прогнозировании будущих параметров еще не изученных кремниевых комплексов.

Ключевые слова: метод функционала плотности DFT, шестикоординационные комплексы кремния, пиридинсодержащие лиганды, энергия реорганизации, внутренняя энергия реорганизации.

A.N. Bimukhanov*, A.A. Aldongarov

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

*e-mail: Bimukhanov.92@gmail.com

Theoretical study of charge transport properties of a Si(DPP)₂ complex

This article provides a study of the calculations of charge transport, reorganization energy, intermolecular transfer integral and charge mobility for the optimized structure of the new neutral hexacoordinated silicon complex Si(DPP)₂. The main calculated and experimental geometric data on the optimized structure are also presented. The complex has a distorted octahedral geometry with short Si-N bond lengths averaging: calculated - 1.958365 Å and experimental - 1.9111 Å. The Si(DPP)₂ structure contains two diphenylpyridine (DPP = 2,6-diphenylpyridine ligand) ligands. Optimization and computational calculations of the necessary data of charge transport were performed using a B3LYP functional and a 6-31G* basis set. Geometrical parameters for structure optimization were obtained from recent, known, experimental data. The obtained theoretical data on the charge transport of the Si(DPP)₂ structure were compared with the known experimental data. Based on a comparison of the theoretical and experimental values for the charge transport properties of the Si(DPP)₂ compound, it was shown that the method we used for calculating the charge mobility gives relatively close values. This work shows that computational methods can help in the further study of future structures, as well as predict the future parameters of as yet unexplored silicon complexes.

Key words: density functional theory DFT, hexacoordinate silicon, pyridine containing ligands, reorganization energy, intermolecular transfer integral, electron transfer rate, charge mobility, organic electronics.

А.Н. Бимуханов*, А.А. Алдонгаров
Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Қазақстан, Нұр-Сұлтан қ.
*e-mail: Bimukhanov.92@gmail.com

Si(DPP)₂ кешенінің заряд трансфердің қасиеттерін теориялық зерттеуі

Бұл мақалада Si(DPP)₂ жаңа бейтарап алтыкоординациялық кремний кешенінің оңтайландырылған құрылымы үшін зарядтың тасымалдануын, қайта құру энергиясын, молекулааралық тасымалдау интегралын, тасымалдау жылдамдығын есептеуді зерттеу ұсынылады. Оңтайландырылған құрылым бойынша негізгі есептік және эксперименттік геометриялық деректер де берілген. Кешеннің қысқа Si-N байланыс ұзындықтарының орташа мәні бар бұрмаланған октаэдрлік геометриясы бар: есептелген - 1,958365 Å және тәжірибелік - 1,9111 Å. Si(DPP)₂ құрылымында екі дифенилпиридин (DPP = 2,6-дифенилпиридин лиганд) лигандтары бар. Оңтайландыру, зарядты тасымалдау қасиеттерін табу үшін қажетті мәліметтерді есептеу есептеулері функционалды – B3LYP және базалық жиынтық – 6-31G* көмегімен орындалды. Құрылымды оңтайландырудың геометриялық параметрлері соңғы, белгілі, тәжірибелік деректерден алынды. Зерттелетін Si(DPP)₂ құрылымының зарядты тасымалдауы туралы алынған теориялық мәліметтер белгілі эксперименттік мәліметтермен салыстырылды. Эксперименттік мәліметтерді компьютерлік есептеулердің нәтижелерімен салыстыру негізінде жақын нәтижесін көрсетті. Бұл жұмыс есептеу әдістері болашақ құрылымдарды одан әрі зерттеуге, сондай-ақ әлі зерттелмеген кремний кешендерінің болашақ параметрлерін болжауға көмектесетінін көрсетеді.

Түйін сөздер: тығыздықтың функционалды теориясы DFT, кремнийдің алтыкоординациялық кешендері, пиридині бар лигандтар, қайта құрылымдау энергиясы, ішкі қайта құру энергиясы.

Введение

В последние годы наблюдается значительный рост интереса к светоизлучающим диодам на основе органических материалов, которые обычно называют органическими светоизлучающими диодами (organic light-emitting diode - OLED) [1,2]. Но в то же время, огромная волна коммерческого успеха порождает острую необходимость повышения эффективности, стабильности и устойчивости новых материалов [3]. Потребность усугубляется недавними достижениями в области органической электроники [4-6]. Органические полупроводники также находят применение в различных устройствах OPV [7-10] и OLED [11-14], в частности, в качестве слоя дырочной проводимости (HTL) [15,16] или в качестве слоя электронной проводимости (ETL) [17].

Изучая недавние достижения в области повышения эффективности, стоит выделить замечательную стабильность шестикоординационных комплексов кремния с пиридинсодержащими лигандами [18,19]. Шестикоординационные комплексы Si(ligand)₂ представляют собой многообещающий новый класс хелатных соединений металлов для органических электронных устройств. Богатое синтетическое разнообразие клешневидных лигандов, должно обеспечить ряд желательных и

подходящих комплексов для слоев переноса электронов и электролюминесценции [20].

В последние несколько лет, работы в области изучения шестикоординационных комплексов кремния с клешневидными лигандами [21,22], вызывают интерес к дальнейшим исследованиям. Желание улучшить физические свойства материалов привело к изучению свойств переноса зарядов. Измерение, оптимизация и установление структурно-функциональных взаимосвязей подвижности электронов и дырок имеет решающее значение для разработки эффективных устройств независимо от функции органического материала.

В данной работе объектом исследования являются нейтральные шестикоординационные кремниевые комплексы, содержащие два дифенилпиридин (DPP = 2,6-diphenylpyridine ligand) лиганда. Целью данной работы является теоретическое исследование свойств переноса заряда, на основе метода функционала плотности, новых нейтральных шестикоординационных кремниевых комплексов Si(DPP)₂.

Материалы и методы

При реализации квантово-химического исследования структуры Si(DPP)₂ использовался метод функционала плотности DFT реализуемый в программном пакете Gaussian09 [23]. На

сегодняшний день этот метод включает широкий набор различных функционалов. Для расчета свойств объектов был использован широко используемый функционал B3LYP [24-26]. Все расчеты проводились с использованием вычислительных ресурсов лаборатории физической и квантовой химии при Евразийском национальном университете им. Л.Н. Гумилева.

Для проведения расчетов рассмотрена структура Si(DPP)₂ (рисунок 1) которая была построена по известным экспериментальным данным [22]. В дальнейшем была выполнена оптимизация структуры с использованием базисного набора: 6-31G* [27-35]. Расчеты частот продемонстрировали отсутствие отрицательных значений, что свидетельствует о том, что все полученные структуры соответствуют глобальному минимуму.

В таблице 1 приведены основные расчетные и экспериментальные [22] геометрические

параметры оптимизированного соединения Si(DPP)₂.



Рисунок 1 - Оптимизированная структура Si(DPP)₂

Таблица 1 - Основные расчетные и экспериментальные геометрические параметры оптимизированного соединения Si(DPP)₂

Si(DPP) ₂		
Номер атома	Длина связи (Å)	
	Расчетные данные	Экспериментальные данные
Si30-C11	1.99151	1.97
Si30-C21	1.99151	1.97
Si30-N29	1.95837	1.9126
Si30-N31	1.95836	1.9095
C11-C14	1.40086	-
C14-C15	1.39673	-
C5-N29	1.35019	-
Линейный угол (°)		
C11-Si30-C21	163.288	-

Обзор литературы

Энергия реорганизации (λ) представляет собой геометрическую энергию релаксации молекулы из заряженного в нейтральное состояние и из нейтрального в заряженное состояние. Энергия реорганизации для дырки (λ_h) и электрона (λ_e) оценивалась как:

$$\lambda_{hole} = \lambda_+ + \lambda_1, \quad (1)$$

$$\lambda_{electron} = \lambda_- + \lambda_2, \quad (2)$$

$$\lambda_{hole} = \lambda_+ + \lambda_1 = [E^+(A) - E^+(A^+)] + [E(A^+) - E(A)] = IP(v) - HEP, \quad (3)$$

где $E(A)$ – энергия нейтральной молекулы после оптимизации; $E(A^+)$ – энергия катиона молекулы после оптимизации; $E+(A^+)$ – энергия положительно заряженной молекулы при геометрии нейтральной молекулы; $E+(A)$ – энергия нейтральной молекулы при

где λ_h и λ_e – энергия релаксации геометрии из нейтрального в заряженное состояние [36], λ_1 и λ_2 – энергия релаксации молекулы из заряженного состояния в нейтральное [37].

Эти два члена были рассчитаны непосредственно из адиабатических поверхностей потенциальной энергии для λ_h и λ_e [38-40].

Энергия реорганизации для дырки (λ_h) рассчитывалась как:

использовании геометрии катиона; $IP(v)$ (vertical ionization potential) – вертикальный потенциал ионизации; HEP (hole extraction potential) – дырочный потенциал извлечения.

Энергия реорганизации электрона (λ_e) будет оцениваться как:

$$\lambda_{electron} = \lambda_- + \lambda_2 = [E^-(A) - E^-(A^-)] + [E(A^-) - E(A)] = EEP - EA(v), \quad (4)$$

где $E(A)$ – энергия нейтральной молекулы после оптимизации; $E(A^-)$ – энергия аниона молекулы после оптимизации; $E-(A^-)$ – энергия отрицательно заряженной молекулы при геометрии нейтральной молекулы; $E-(A)$ – энергия нейтральной молекулы при использовании геометрии аниона; $EA(v)$ (vertical

electron affinity) – вертикальное сродство к электрону; EEP (electron extraction potential) – потенциал извлечения электрона.

На рисунке 2 представлено схематическое распределение внутренней энергии реорганизации для переноса дырок и электронов.

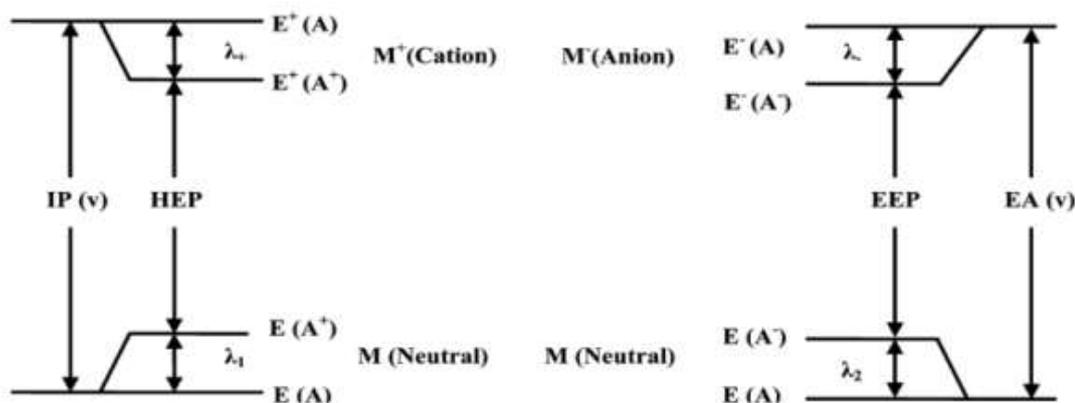


Рисунок 2 - Внутренняя энергия реорганизации для переноса дырок и электронов

На следующем этапе были выполнены расчеты, связанные с интегралом межмолекулярного переноса. Появляющийся интеграл межмолекулярного переноса $V_{h/e}$ характеризует силу электронной связи между соседними молекулами. Самый простой подход, который широко использовался для оценки электронных взаимодействий в органических полупроводниках, относится к теореме Купманса

[41], которая основана на одноэлектронном приближении. Абсолютные значения интеграла межмолекулярного переноса можно хорошо оценить как половину электронного расщепления уровней НОМО (LUMO) для дырок (электронов) в димере, состоящий из двух нейтральных молекул.

$$V_{h/e} = \frac{\varepsilon_{H[L+1]} - \varepsilon_{H-1[L]}}{2}, \quad (5)$$

где $\varepsilon_{H[L+1]}$ – энергия НОМО (LUMO+1); $\varepsilon_{H-1[L]}$ – энергия НОМО-1, (LUMO), взятые из

замкнутой конфигурации нейтрального состояния димера.

Дальнейшим действием было нахождение скачковой скорости переноса заряда, которая может быть приблизительно описана уравнением Маркуса-Хаша [42,43].

$$K_{et_{h/e}} = \left(\frac{\pi}{\lambda_{h/e} k_B T} \right)^{1/2} \times \frac{V_{h/e}^2}{\hbar} \times \exp \left(- \frac{\lambda_{h/e}}{4 k_B T} \right), \quad (6)$$

где $V_{h/e}$ – интеграл межмолекулярного переноса; T – температура; k_B – постоянная Больцмана; \hbar – постоянная Планка; $\lambda_{h/e}$ – энергия реорганизации дырки/электрона.

Известно, что перенос заряда может быть охарактеризован процессом диффузии, при котором носитель заряда прыгает между соседними молекулами в соответствии со скоростями переноса заряда, которые применяются в отсутствие внешнего электрического поля. В пределе слабого поля подвижность носителей хорошо описывается соотношением Эйнштейна [44].

$$\mu = \frac{eD}{k_B T}, \quad (7)$$

где e – заряд электрона, D – коэффициент диффузии носителей заряда

Коэффициент диффузии носителей заряда который можно рассчитать с помощью уравнения Эйнштейна-Смолуховского [45]

$$D = \frac{L^2 K_{et}}{2}.$$

Результаты и обсуждение

В таблицах 2 и 3 указаны данные для вычисления энергии реорганизации для дырки и электрона соответственно.

Таблица 2 - Данные энергии реорганизации для дырки

λ_{hole} (эВ)			
E(A)	E(A+)	E+(A+)	E+(A)
-92911,0676	-92905,27374	-92905,20803	-92911,00102

Таблица 3 - Данные энергии реорганизации для электрона

$\lambda_{electron}$ (эВ)			
E(A)	E(A-)	E-(A-)	E-(A)
-92911,0676	-92911,67285	-92911,61771	-92910,96724

Используя данные из таблиц 2 и 3, были получены следующие результаты для энергии реорганизации:

$$\lambda_{hole} = 0,85e-3 \text{ (эВ)}, \lambda_{electron} = 45,2e-3 \text{ (эВ)}$$

Для вычисления интеграла межмолекулярного переноса использовались данные из таблицы 4

Таблица 4 - Данные интеграла межмолекулярного переноса для дырки и электрона

V_{hole} (эВ)		$V_{electron}$ (эВ)	
$E_{НОМО}$	$E_{НОМО-1}$	E_{LUMO}	E_{LUMO+1}
-4,989568	-4,98984	-1,425824	-1,425008

Полученные результаты вычисления интеграла межмолекулярного переноса:

$$V_{hole} = 0,13e-3 \text{ (эВ)}, V_{electron} = 0,4e-3 \text{ (эВ)}$$

Используя ранее полученные результаты, а также известные физические константы находим скорость переноса электронов:

$$K_{hole} = 1,06e+10 \text{ (с}^{-1}\text{)}, K_{electron} = 8,48e+09 \text{ (с}^{-1}\text{)}$$

Для расчета коэффициента диффузии носителей заряда необходимо знать значения расстояния в димере. На рисунке 3 представлена структура нейтрального симметричного димера из соединения Si(DPP)₂.

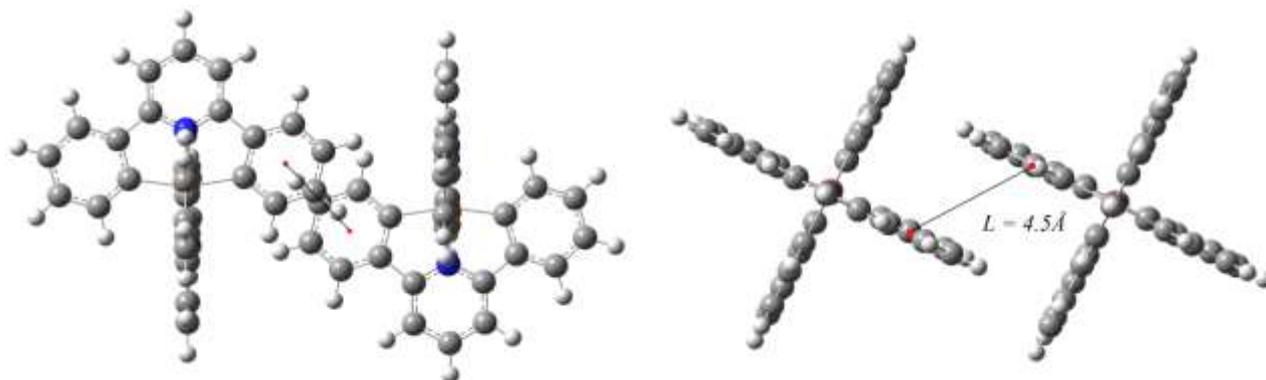


Рисунок 3 - Структура нейтрального симметричного димера из соединения Si(DPP)₂

Для вычисления значения диффузии, из известных экспериментальных данных [14] по рассматриваемой структуре Si(DPP)₂, возьмем расстояние в димере (*L*) равным 4.5Å:

$$D_{hole} = 1,07e-05 \text{ (см}^2\text{с}^{-1}\text{)}, \\ D_{electron} = 8,58e-06 \text{ (см}^2\text{с}^{-1}\text{)}$$

Полученные ранее результаты позволяют найти подвижность заряда для дырки и электрона:

$$\mu_{hole} = 4,26E-04 \text{ (см}^2\text{В}^{-1}\text{с}^{-1}\text{)},$$

$$\mu_{electron} = 3,4E-04 \text{ (см}^2\text{В}^{-1}\text{с}^{-1}\text{)}$$

Ниже в таблице 5 приведены полученные результаты в сравнении с ранее полученными экспериментальными данными [14] по рассматриваемой структуре Si(DPP)₂.

Таблица 5 - Результаты теоретических и экспериментальных данных для структуры Si(DPP)₂

Значения	Дырка	Электрон
λ (мэВ)	0,85	45,2
V (мэВ)	0,13	0,4
μ_{calc} (см ² В ⁻¹ с ⁻¹)	$4,26 \times 10^{-4}$	$3,4 \times 10^{-4}$
μ_{exp} (см ² В ⁻¹ с ⁻¹)	$1,1 \times 10^{-5}$	18×10^{-5}

Заключение

В данной работе мы исследовали теоретические и экспериментальные данные свойств переноса заряда нейтрального, гексакоординационного, кремниевого комплекса Si(DPP)₂. С использованием функционала - B3LYP и базисного набора - 6-31G* мы рассчитали необходимые данные для получения теоретических результатов по исследуемой структуре. Полученные теоретические данные сравнивались с известными экспериментальными данными. На основании сравнения теоретических

и экспериментальных значений по свойствам переноса заряда исследуемой структуры было показано, что использованный метод расчета подвижности зарядов дает расхождение на порядок величины в сравнении с экспериментальными данными для кремниевого комплекса Si(DPP)₂. Расхождение в величинах подвижности зарядов можно объяснить приближениями использованных моделей и так же не учётом влияния окружения других молекул, так как в модели рассматривался только димер молекулы Si(DPP)₂. Таким образом, расчеты в приближении DFT можно использовать для

определения подвижности зарядов в шестикоординационных комплексах кремния с учетом этой погрешности.

Благодарности

Исследование выполнено при финансовой

поддержке Комитета науки Министерства образования и науки Республики Казахстан (грант №AP08052504 «Моделирование и разработка новых нейтральных шестикоординационных комплексов кремния для органической электроники»).

Литература

- 1 Kwon B. et al. Organic/Inorganic Hybrid Thin-Film Encapsulation Using Inkjet Printing and PEALD for Industrial Large-Area Process Suitability and Flexible OLED Application // *ACS Appl. Mater. Interfaces*. – 2021. – Vol. 13. – P. 55391–55402.
- 2 Joo W. et. al. Metasurface-Driven OLED Displays Beyond 10,000 Pixels per Inch // *Science*. – 2020. – Vol. 370. – P. 459–463.
- 3 Song J. et al. Organic Light-Emitting Diodes: Pushing Toward the Limits and Beyond // *Adv. Mater.* – 2020. – Vol. 32, – P. 1907539.
- 4 Zhang, D. et al. Emerging Self-Emissive Technologies for Flexible Displays // *Adv. Mater.* – 2020. – Vol. 32. – P. 1902391.
- 5 Bae S.K. et al. Transparent Ultra-Thin Silver Electrodes Formed via a Maskless Evaporation Process for Applications in Flexible Organic Light-Emitting Devices // *Nano Energy*. - 2020. - Vol. 71, - P. 104649.
- 6 Li N. et al. Molecular Engineering by σ -Bond Spacer Enables Solution-Processable Host Materials for TADF Emitter towards High-Performance OLEDs // *Chem. Eng. J.* - 2020. - Vol. 396. – P. 125276.
- 7 Green M.A. et al. Solar cell efficiency tables (version 50) // *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*. - 2017. – Vol. 25. – P. 668-676.
- 8 Zhao W. et al. Molecular Optimization Enables over 13% Efficiency in Organic Solar Cells // *J. Am. Chem. Soc.* – 2017. – Vol. 139. – P. 7148–7151.
- 9 Kang H. et al. Bulk-Heterojunction Organic Solar Cells: Five Core Technologies for Their Commercialization // *Adv. Mater.* – 2016. – Vol. 28. – P. 7821–7861.
- 10 Hedley G.J. et al. Light Harvesting for Organic Photovoltaics // *Chem. Rev.* - 2017. - Vol. 117(2). – P. 796-837.
- 11 Tremblay J.-F. et al. The rise of OLED displays // *C&EN*. – 2016. - Vol. 94(28). – P. 30-34.
- 12 Kim Y. et al. An ultra thin implantable system for cerebral blood volume monitoring using flexible OLED and OPD // *Int. El. Devices Meet.* – 2015. 29.6.1-26.6.4.
- 13 Man J.-X. et al. Black Phase-Changing Cathodes for High-Contrast Organic Light-Emitting Diodes // *ACS Photonics*. – 2017. – Vol. 4. – P. 1316-1321.
- 14 Levermore P. et al. Ink-Jet-Printed OLEDs for Display Applications // *SID Int. Symp. Dig. Tec.* – 2016. – Vol. 47. – P. 484-486.
- 15 Xu H. et al. Printable Hole Transport Layer for 1.0 cm² Organic Solar Cells // *ACS Appl. Mater. Interfaces*. – 2020. – Vol. 12(46). – P. 52028–52037.
- 16 Kang S. et al. Improved Electroluminescence Performance of Perovskite Light-Emitting Diodes by a New Hole Transporting Polymer Based on the Benzocarbazole Moiety // *ACS Appl. Mater. Interfaces*. – 2020. – Vol. 12(46). – P. 51756–51765.
- 17 Kim J.-H. et al. Designing an electron-transport layer for highly efficient, reliable, and solution-processed organic light-emitting diodes // *J. Mater. Chem. C*. – 2017. – Vol. 5(12). – P. 3097–3106.
- 18 Peloquin D.M. et al. Recent advances in hexacoordinate silicon with pyridine-containing ligands: Chemistry and emerging applications // *Coord. Chem. Rev.* – 2016. – Vol. 323. – P. 107–119.
- 19 Li Y. et al. Optical dielectric function of Si(2,6-bis(benzimidazol-2'-yl)pyridine)₂ determined by spectroscopic ellipsometry // *Opt. Mat. Express*. – 2019. – Vol. 9(8). – P. 3469-3475.
- 20 Kocherga M. et al. Si(bzimpy)₂ – a hexacoordinate silicon pincer complex for electron transport and electroluminescence // *Chem. Commun.* – 2018. – Vol. 54(100). – P. 14073–14076.
- 21 Kocherga M. et al. Exploring the molecular electronic device applications of synthetically versatile silicon pincer complexes as charge transport and electroluminescent layers // *Mater. Adv.* - 2021.
- 22 Earnhardt A.W. et al. Bipolar charge transport in a robust hexacoordinate organosilane // *Journal of Organometallic Chemistry*. – 2021. – Vol. 961.
- 23 Frisch M.J., et al. Gaussian 09, Revision E.01 (Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2010).
- 24 Becke A.D. Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange // *J. Chem. Phys.* – 1993. – Vol. 98. – P. 5648.
- 25 Lee C. et al. Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density // *Phys. Rev.* – 1988. - Vol. 37. – P. 785.

- 26 Stephens P.J. et al. Ab Initio Calculation of Vibrational Absorption and Circular Dichroism Spectra Using Density Functional Force Fields // *J. Phys. Chem.* – 1994. – Vol. 98, - P. 11623.
- 27 Hehre W.J. et al. Self-Consistent Molecular Orbital Methods. Further extensions of Gaussian-type basis sets for use in molecular-orbital studies of organic-molecules // *J. Chem. Phys.* – 1972. – Vol. 56. – P. 2257.
- 28 Hariharan P.C., Pople J.A. Influence of polarization functions on molecular-orbital hydrogenation energies // *Theor. Chem. Acc.* – 1973. – Vol. 28. – P. 213-22.
- 29 Hariharan P.C., Pople J.A. Accuracy of AH equilibrium geometries by single determinant molecular-orbital theory // *Mol. Phys.* – 1974. – Vol. 27. – P. 209-214.
- 30 Gordon M.S. The isomers of silacyclop propane // *Chem. Phys. Lett.* - 1980. - Vol. 76. - P.163-68.
- 31 Francl M.M. et al. Self-Consistent Molecular Orbital Methods. 23. A polarization-type basis set for 2nd-row elements // *J. Chem. Phys.* – 1982. – Vol. 77. – P. 3654-65.
- 32 Binning Jr R.C., Curtiss L.A. Compact contracted basis-sets for 3rd-row atoms - GA-KR // *J. Comp. Chem.* – 1990. – Vol. 11. – P. 1206-16.
- 33 Blaudeau J.-P. et al. Extension of Gaussian-2 (G2) theory to molecules containing third-row atoms K and Ca // *J. Chem. Phys.* – 1997. – Vol. 107. – P. 5016-21.
- 34 Rassolov V.A. et al. 6-31G* basis set for atoms K through Zn // *J. Chem. Phys.* - 1998. - Vol. – P. 109. – P. 1223-29.
- 35 Rassolov V.A. et al. 6-31G* Basis Set for Third-Row Atoms // *J. Comp. Chem.* – 2001. – Vol. 22. – P. 976-84.
- 36 Gruhn N. E. et al. The Vibrational Reorganization Energy in Pentacene: Molecular Influences on Charge Transport // *J. Am. Chem. Soc.* – 2002. – Vol. 124. – P. 7918-19.
- 37 Reimers J.R. A practical method for the use of curvilinear coordinates in calculations of normal-mode-projected displacements and Duschinsky rotation matrices for large molecules // *J. Chem. Phys.* – 2001. – Vol. 115. – P. 9103.
- 38 Li Y. et al. Theoretical study on the electronic structures and photophysical properties of a series of dithienylbenzothiazole derivatives // *Comput. Theor. Chem.* – 2012. – Vol. 981. – P. 14-24.
- 39 Irfan A. et al. Designing of Disubstituted Derivatives of mer-Alq₃: Quantum Theoretical Study // *Theor. Chem. Acc.* – 2009. – Vol. 122. – P. 275.
- 40 Coropceanu V. et al. Probing Charge Transport in π -Stacked Fluorene-Based Systems // *J. Phys. Chem. B.* – 2006. – Vol. 110. – P. 9482.
- 41 Coropceanu V. et al. Charge Transport in Organic Semiconductors // *Chem. Rev.* - 2007. - Vol. 107. – P. 926..
- 42 Marcus R.A., Sutin N. Electron transfers in chemistry and biology // *Biochim. Biophys. Acta.* – 1985. – Vol. 811. – P. 265.
- 43 Marcus R.A. Electron transfer reactions in chemistry. Theory and experiment // *Rev. Mod. Phys.* – 1993. – Vol. 65. – P. 599.
- 44 Wang L.J. et al. Computational methods for design of organic materials with high charge mobility // *Chem. Soc. Rev.* – 2010. – Vol. 39. – P. 423.
- 45 Kuo M.Y. et al. Cyanation: providing a three-in-one advantage for the design of n-type organic field-effect transistors // *Chem.—Eur. J.* – 2007. – Vol. 13. – P. 4750.

References

- 1 B. Kwon, et al. *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 13, 55391–55402 (2021).
- 2 W. Joo, et. al. *Science*, 370, 459–463 (2020).
- 3 J. Song, et al. *Adv. Mater.*, 32, 1907539 (2020).
- 4 D. Zhang, et al. *Adv. Mater.*, 32, 1902391 (2020).
- 5 S.K Bae, et al. *Nano Energy*, 71, 104649 (2020).
- 6 N. Li, et al. *Chem. Eng. J.*, 396, 125276 (2020).
- 7 M.A. Green, et al. *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, 25, 668-676 (2017).
- 8 W. Zhao, et al. *J. Am. Chem. Soc.*, 139, 7148–7151 (2017).
- 9 H. Kang, et al. *Adv. Mater.* 28, 7821–7861 (2016).
- 10 G.J. Hedley, et al. *Chem. Rev.*, 117(2), 796-837 (2017).
- 11 J.-F. Tremblay, et al. *C&EN.*, 94(28), 30-34 (2016).
- 12 Y. Kim, et al. *Int. El. Devices Meet.*, 29.6.1-26.6.4 (2015).
- 13 J.-X. Man, et al. *ACS Photonics*, 4, 1316-1321 (2017).
- 14 P. Levermore, et al. *SID Int. Symp. Dig. Tec.*, 47, 484-486 (2016).
- 15 H. Xu, et al., *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 12(46), 52028–52037 (2020).
- 16 S. Kang, et al. *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 12(46), 51756–51765 (2020).
- 17 J.-H. Kim, et al. *J. Mater. Chem. C.*, 5(12), 3097–3106 (2017).
- 18 D.M. Peloquin, et al. *Coord. Chem. Rev.*, 323, 107–119 (2016).
- 19 Y. Li, et al. *Opt. Mat. Express*, 9(8), 3469-3475 (2019).
- 20 M. Kocherga, et al. *Chem. Commun.*, 54(100), 14073–14076 (2018).
- 21 M. Kocherga, et al. *Mater. Adv.*, (2021). <https://doi.org/10.1039/D1MA00737H>.

- 22 A.W. Earnhardt, et al. *Journal of Organometallic Chemistry*, 961, (2021).
- 23 M.J. Frisch, et al. *Gaussian 09, Revision E.01* (Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2010).
- 24 A.D. Becke, *J. Chem. Phys.*, 98, 5648 (1993).
- 25 C. Lee, et al., *Phys. Rev.*, 37, 785 (1988).
- 26 P.J. Stephens, et al., *J. Phys. Chem.*, 98, 11623 (1994).
- 27 W.J. Hehre, et al., *J. Chem. Phys.*, 56, 2257 (1972).
- 28 P.C. Hariharan, J.A. Pople, *Theor. Chem. Acc.*, 28, 213-22 (1973).
- 29 P.C. Hariharan, J.A. Pople, *Mol. Phys.*, 27, 209-214 (1974).
- 30 M.S. Gordon, *Chem. Phys. Lett.*, 76, 163-68 (1980).
- 31 M.M. Francl, et al., *J. Chem. Phys.*, 77, 3654-65 (1982).
- 32 R.C. Binning Jr, *J. Comp. Chem.*, 11, 1206-16 (1990).
- 33 J.-P. Blaudeau, et al., *J. Chem. Phys.*, 107, 5016-21 (1997).
- 34 V.A. Rassolov, et al., *J. Chem. Phys.*, 109, 1223-29 (1998).
- 35 V.A. Rassolov, et al., *J. Comp. Chem.*, 22, 976-84 (2001).
- 36 N.E. Gruhn, et al., *J. Am. Chem. Soc.*, 124, 7918-19 (2002).
- 37 J.R. Reimers, *J. Chem. Phys.*, 115, 9103 (2001).
- 38 Y. Li, et al., *Comput. Theor. Chem.*, 981, 14-24 (2012).
- 39 A. Irfan, et al., *Theor. Chem. Acc.*, 122275 (2009).
- 40 V. Coropceanu, et al., *J. Phys. Chem. B.*, 110, 9482 (2006).
- 41 V. Coropceanu, et al., *Chem. Rev.*, 107, 926 (2007).
- 42 R.A. Marcus, N. Sutin, *Biochim. Biophys. Acta.*, 811, 265 (1985).
- 43 R.A. Marcus, *Rev. Mod. Phys.*, 65, 599 (1993).
- 44 L.J. Wang, et al., *Chem. Soc Rev.*, 39, 423 (2010).
- 45 M.Y. Kuo, et al., *Chem.—Eur. J.*, 13, 4750 (2007).

MPNТИ 41.29.25

<https://doi.org/10.26577/RCPH.2022.v81.i2.03>Ш.А. Мырзакулова^{1,2*} , О.В. Разина^{1†} ,Н.А. Мырзакулов^{1,2*} , А.Б. Алтайбаева¹ ¹Евразийский национальный университет им.Л.Н. Гумилева, Казахстан, г. Нур-Султан ²Евразийский международный центр теоретической физики им. Р. Мырзакулова, Казахстан, г. Нур-Султан

*email: shamyrzakulova@gmail.com, †email: olvikraz@mail.ru

ИНФЛЯЦИЯ МЕДЛЕННОГО СКАТЫВАНИЯ В МОДЕЛИ К-ЭССЕНЦИИ С ПЕРИОДИЧЕСКОЙ ФУНКЦИЕЙ СКАЛЯРНОГО ПОЛЯ

В данной работе рассмотрена периодическая космологическая модель. Ранее предполагали, что расширение Вселенной со временем замедляется. Теоретики исходили из предположения, что основную часть массы Вселенной составляет материя – как видимая, так и невидимая (тёмная материя). На основании новых наблюдений, свидетельствующих об ускорении расширения, было найдено, что во Вселенной существует ранее неизвестная энергия с отрицательным давлением (уравнение состояния). Её назвали «тёмной энергией». В данной работе рассмотрена скалярная космологическая модель. Выведен лагранжиан и получена система уравнения движения. Для исследования модели выбрано скалярное поле в виде периодической функции. Вычислены параметр Хаббла, масштабный фактор, который имеет смысл радиуса Вселенной, и в случае периодической функции скалярного поля имеющий экспоненциальную зависимость, плотность темной энергии, давление и потенциал скалярного поля и построены их графики на участке зависимости времени от 0 до 2π . Для исследования инфляционной модели введен потенциал в степенном виде. Из него выведены параметры медленного скатывания через е-фолдинг и построен график спектральных индексов для этой модели. Полученные результаты согласуются с данными наблюдений Planck и подтверждают соответствие исследуемой модели с ранее предложенными.

Ключевые слова: скалярное поле, расширение Вселенной, темная энергия, масштабный фактор, космологические решения, е-фолдинг.

Ш.А. Мырзақұлова^{1,2*}, О.В. Разина^{1†}, Н.А. Мырзақұлов^{1,2*}, А.Б. Алтайбаева¹¹Л.Н. Гумилев ат. Еуразия ұлттық университеті, Қазақстан, Нұр-Сұлтан қ.²Р. Мырзақұлов ат. Еуразиялық халықаралық теориялық физика орталығы, Қазақстан, Нұр-Сұлтан қ.

*email: shamyrzakulova@gmail.com, †email: olvikraz@mail.ru

Периодты скаляр өріс функциясы бар k -essence моделіндегі баяу сырғу инфляциясы

Бұл жұмыста периодты космологиялық модель қарастырылды. Бұрын ғаламның кеңеюі уақыт өте баяулайды деп болжанған болатын. Бұл теоретиктер Әлем массасының негізгі бөлігін – көрінетін және көрінбейтін (қараңғы материя) материя құрайды деген болжамнан шықты. Кеңеюдің үдеуін көрсететін жаңа бақылаулар негізінде Әлемде теріс қысымы бар (күй теңдеуі) бұрын белгісіз энергия бар екені анықталды. Олар оны «күңгірт энергия» деп атады. Бұл жұмыста скалярлық космологиялық модель қарастырылды. Лагранжиан қорытылып шығарылып, қозғалыс теңдеулер жүйесі алынды. Модельді зерттеу үшін периодтық функция түріндегі скаляр өріс таңдалды. Хаббл параметрі, Ғалам радиусының мағынасына ие және экспоненциалды тәуелділікке ие скаляр өрісінің периодтық функциясы жағдайында масштабты фактор, күңгірт энергияның тығыздығы мен қысымы және скаляр өрістің потенциалы есептелді, ал олардың 0-ден 2π аралығында уақытқа тәуелділік графиктері салынды. Инфляциялық модельді зерттеу үшін дәрежелік потенциал енгізілді. Одан е-фолдинг арқылы баяу сырғу параметрлері шығарылды және осы модель үшін спектрлік индекстер графигі тұрғызылды. Алынған нәтижелер Планк

бақылау деректерімен сәйкес келеді және зерттеліп отырған модельдің бұрын ұсынылған деректермен сәйкестігі расталды.

Түйін сөздер: скалярлы өріс, масштабты фактор, космологиялық шешімдер, Ғаламның кеңеюі, күңгірт энергия, е-фолдинг.

S.A. Myrzakulova^{1,2*}, O.V. Razina^{1†}, N.A. Myrzakulov^{1,2}, A.B. Altaybaeva¹

¹L.N. Gumilyov Eurasian National University, Kazakhstan, Nur-Sultan

²Ratbay Myrzakulov Eurasian International Centre for Theoretical Physics, Kazakhstan, Nur-Sultan

*email: shamyrzakulova@gmail.com, †email: olvikraz@mail.ru

Slow-roll inflation in the k -essence model with a periodic scalar field function

In this paper, a periodic cosmological model is considered. Previously, it was assumed that the expansion of the universe slows down over time. Theorists proceeded from the assumption that the main part of the mass of the Universe is matter - both visible and invisible (dark matter). On the basis of new observations indicating the acceleration of expansion, it was found that in the Universe there is a previously unknown energy with negative pressure (equation of state). They called it "dark energy". In this paper, a scalar cosmological model is considered. The Lagrangian is derived and the system of equations of motion is obtained. To study the model, a scalar field in the form of a periodic function was chosen. The Hubble parameter, the scale factor, which has the meaning of the radius of the Universe, and in the case of a periodic function of the scalar field, which has an exponential dependence, the density of dark energy, the pressure and the potential of the scalar field are calculated, and their graphs are plotted in the time dependence section from 0 to 2π . To study the inflationary model, the potential is introduced in a power-law form. From it, the parameters of slow rolling through e-folding are derived and a plot of spectral indices for this model is plotted. The results obtained are consistent with the Planck observational data and confirm the correspondence of the model under study with the previously proposed ones.

Key words: scalar field, expansion of the Universe, dark energy, scale factor, cosmological solutions, e-folding.

Введение

Анализируя результаты наблюдений галактик и реликтового излучения, астрономы пришли к выводу, что распределение вещества во Вселенной (область исследуемого пространства превышала 100 Мпс в поперечнике) является однородным и изотропным, т.е. не зависит от положения и направления в пространстве. А такие свойства пространства, согласно теории относительности, неизбежно влекут за собой изменение со временем расстояний между телами, заполняющими Вселенную, т.е. Вселенная должна расширяться или сжиматься, причем наблюдения указывают на расширение. Вывод о том, что Вселенная расширяется, подтверждают наблюдения красного смещения в спектрах галактик.

Современные астрофизические наблюдения показывают, что Вселенная расширяется

ускоренно – то есть удаленные галактики со временем разлетаются все быстрее. Этот факт требует физической интерпретации, ведь гравитация – взаимодействие, которое считается доминирующим на крупных масштабах, – лишь притягивает объекты друг к другу. В стандартной космологической модели ускоренное расширение описывают при помощи космологической постоянной – величины, которая описывает плотность энергии чистого вакуума (темной энергии) в уравнениях Общей теории относительности и обеспечивает отталкивание между далекими объектами [1-4].

Это мотивирует ученых придумывать альтернативные модели, которые объясняли бы ускоренное расширение Вселенной, но не привлекали для этого космологической постоянной. Некоторые физики предлагают модифицировать теорию гравитации, другие – предположить, что расширение Вселенной

неоднородно, а мы просто оказались в области, которая расширяется быстрее среднего, третьи – отказаться от ускоренного расширения как такового и искать ошибку в измерениях, которые о нем свидетельствуют. Тем не менее модель с космологической постоянной пока остается предпочтительной [5-8].

К огромному сожалению, у нас нет возможности отмотать время назад и посмотреть, как развивалась Вселенная в первые минуты своей жизни. Прибегая к математике и полученным в результате наблюдений данным, лучшие умы планеты строят самые смелые модели. Одна из них — космическая инфляция [9-12].

Инфляционная модель Вселенной предполагает, что до горячей стадии (то, что в обычной теории Большого взрыва считается началом времени) существовала другая эпоха с совсем иными свойствами. В то время пространство расширялось экспоненциально быстро благодаря заполнявшему его специфическому полю. За крохотные доли секунды пространство растянулось в невероятное количество раз. Вселенная оказалась в целом однородной, так как произошла из существовавшего на предыдущей стадии чрезвычайно малого объема. К тому же, если в ней и были какие-то геометрические неоднородности, они разгладились во время инфляционного расширения [13-18].

Методы исследования

Уравнения движения для полной теории в присутствии вещества можно получить из следующего действия

$$S = \int \left(\frac{R}{2k} + L_m \right) \sqrt{-g} d^4x, \quad (1)$$

$$\frac{\delta S}{\delta g^{\mu\nu}} = 0, \quad (2)$$

$$R_{\mu\nu} - \frac{1}{2} g_{\mu\nu} R = T_{\mu\nu}(\varphi), \quad (3)$$

где левая сторона зависит только от метрики, а правая только от скалярного поля.

Интервал в настоящее время известный как метрика Фрийдмана–Лемэтра–Робертсона–Уокера (ФЛРУ) в сферических координатах имеет вид

$$ds^2 = -dt^2 + a^2(t) \left(\frac{dr^2}{1-kr^2} + r^2(d\theta^2 + \sin^2(\theta)d\varphi^2) \right), \quad (4)$$

где k определяет кривизну и равно

$$k = \begin{cases} > 0, & \text{закрытая Вселенная} \\ < 0, & \text{открытая Вселенная} \\ = 0, & \text{плоская Вселенная.} \end{cases} \quad (5)$$

Для этой метрики скалярная кривизна вычисленная с помощью метрического тензора и символов Кристоффеля равна

$$R = 6\frac{\ddot{a}}{a} + 6\frac{\dot{a}^2}{a^2} + 6\frac{k}{a^2}. \quad (6)$$

Лагранжиан будет выглядеть следующим образом

$$L = r^2 \sin^2 \theta \sqrt{\frac{1}{1-kr^2}} (-3a\dot{a}^2 + 3ka + \frac{1}{2}a^3\dot{\varphi}^2 - a^3V), \quad (7)$$

где мы уже расписали общий вид лагранжиана скалярного поля с учетом метрики ФЛРУ (4).

Воспользуясь уравнением Эйлера-Лагранжа и условием нулевой энергии, мы получим систему уравнений движения

$$3H^2 + \frac{3k}{a^2} = \rho, \quad (8)$$

$$3H^2 + 2\dot{H} + \frac{k}{a^2} = -p, \quad (9)$$

$$\ddot{\varphi} + 3H\dot{\varphi} + V_{\varphi} = 0, \quad (10)$$

$$\dot{\rho} + 3H(\rho + p) = 0, \quad (11)$$

где $\rho = \frac{1}{2}\dot{\varphi}^2 + V$, $p = \frac{1}{2}\dot{\varphi}^2 - V$.

Результаты и обсуждение

Пример 1. В этом примере будем считать, что $k = 0$, т.е. рассмотрим случай плоской Вселенной. Для исследования модели и поиска решения выберем скалярное поле в виде тригонометрической функции

$$\varphi = \varphi_0 \cos \alpha t + \beta, \quad (12)$$

где φ_0 , α , β - некие постоянные и $\alpha > 0$.

На рисунке 1 показана зависимость функции скалярного поля $\varphi(t)$ (12) от времени t на участке от 0 до 2π , т.е в нашей модели мы выбрали промежуток времени в котором результаты совпадают с наблюдательными и теоретическими данными соответствующими современной Вселенной. Для того чтобы скалярное поле медленно скатывалась вниз необходимо, чтобы $\alpha > 0$. Зная вид функции скалярного поля (12) и используя уравнения Фридмана (8) и (9) вычислим параметр Хаббла

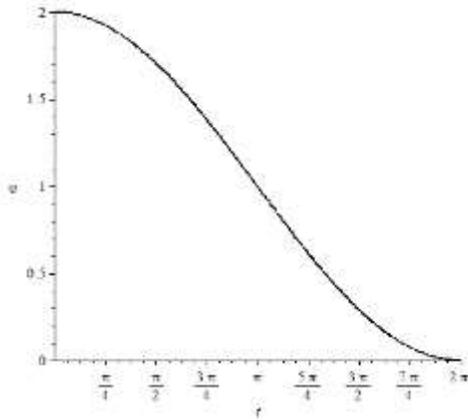


Рисунок 1- Зависимость скалярного поля φ от времени t , при $\varphi_0 = 1, \alpha = 0.5, \beta = 1$

$$H = \frac{\varphi_0^2 \alpha}{8} (\sin 2\alpha t - 2\alpha t) + H_0, \quad (13)$$

где H_0 – константа интегрирования.

Для дальнейших вычислений нам также понадобится значение первой производной от параметра Хаббла по времени t

$$\dot{H} = -\frac{\varphi_0^2 \alpha^2 \sin^2 \alpha t}{2}. \quad (14)$$

Используя определение параметра Хаббла $H = \frac{\dot{a}}{a}$ и зная его явный вид (13) найдем масштабный фактор $a(t)$ который имеет смысл радиуса Вселенной

$$a = e^{\frac{\varphi_0^2 \cos^2 \alpha t + \varphi_0^2 \alpha^2 t^2}{8} + H_0 t + a_0}, \quad (15)$$

где a_0 константа интегрирования.

На рисунке 2 показана зависимость масштабного фактора a от времени t (15).

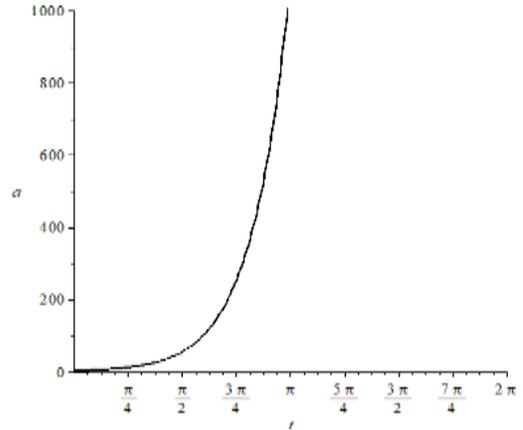


Рисунок 2- Зависимость масштабного фактора a от времени t , при $H_0 = 2, a_0 = 1, \varphi_0 = 1, \alpha = 0.5$

Полученный масштабный фактор имеет вид экспоненциальной функции и хорошо описывает ускоренное расширение Вселенной. Из уравнения (8) и (9) найдем плотность темной энергии, давление и потенциал скалярного поля

$$\rho = 3H^2 = 3\left(\frac{\varphi_0^2 \alpha}{8} (\sin 2\alpha t - 2\alpha t) + H_0\right)^2, \quad (16)$$

На рисунках 3 и 4 показана зависимость плотности темной энергии и давления в зависимости от времени t на участке от 0 до 2π , при $\alpha = 1, H_0 = 5, \varphi_0 = 1$.

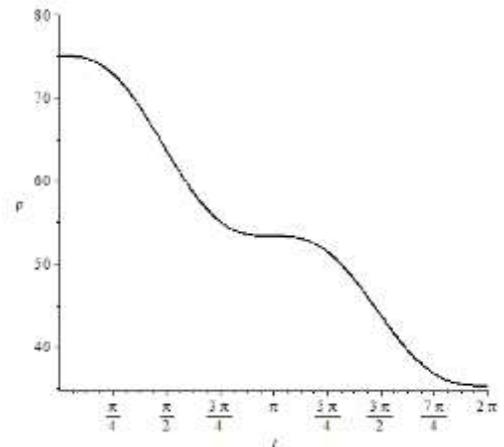


Рисунок 3- Зависимость плотности темной энергии ρ от времени t

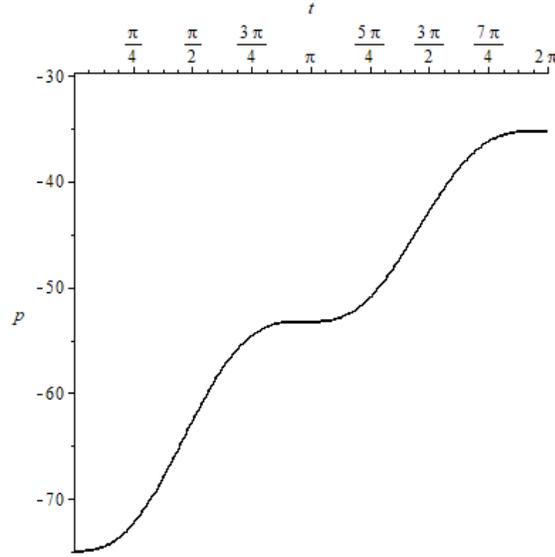


Рисунок 4- Зависимость давления p от времени t

$$p = -3H^2 - 2\dot{H} = -3\left(\frac{\varphi_0^2 \alpha}{8} (\sin 2\alpha t - 2\alpha t) + H_0\right)^2 + \varphi_0^2 \alpha^2 \sin^2 \alpha t. \quad (17)$$

$$V = 3H^2 + 2\dot{H} = -\frac{3}{16} \varphi_0^4 \alpha^2 \cos^4 \alpha t + \varphi_0^2 \alpha^2 \cos^2 \alpha t \left(\frac{3}{16} \varphi_0^2 + \frac{1}{2}\right) - \frac{3}{4} \varphi_0^2 \alpha \sin 2\alpha t \left(\frac{1}{4} \varphi_0^2 \alpha^2 t - H_0\right) + \frac{3}{2} \varphi_0^2 \alpha^2 t \left(\frac{1}{8} \varphi_0^2 \alpha^2 t - H_0\right) - \frac{1}{2} \varphi_0^2 \alpha^2 + 3H_0^2. \quad (18)$$

Для описания процесса инфляции введем параметр медленного скатывания в терминах параметра Хаббла

$$\eta_V \approx \varepsilon_H, \quad (22)$$

$$\eta_H = -\frac{\ddot{\varphi}}{H\dot{\varphi}} = -\frac{1}{2} \frac{\ddot{H}}{\dot{H}H}. \quad (19)$$

$$\eta_V \approx \varepsilon_H + \eta_H. \quad (23)$$

Таким образом, требование пренебречь слагаемым $\ddot{\varphi}$ по сравнению с $3H\dot{\varphi}$ просто требование, чтобы $\eta \ll 1$. В терминах потенциала пара параметров медленного скатывания ε_V и η_V определяется как

$$\varepsilon_V \equiv \frac{1}{2} \left(\frac{\partial_\varphi V}{V}\right)^2, \quad (20)$$

$$\eta_V \equiv \frac{\partial_\varphi^2 V}{V}. \quad (21)$$

Они равны только параметрам медленного скатывания Хаббла, если они маленькие

Параметры медленного скатывания более высокого порядка определяются, либо как высшие производные от потенциала, либо параметра Хаббла. Обратим внимание, что для успешного существования инфляции единственным критерием является условие $0 < \varepsilon < 1$. Величина η не имеет прямого значения. Косвенным значением является то, что большие значения η могут заставить расти ε [19]

$$\frac{d\varepsilon}{dN} = 2\varepsilon(\eta - \varepsilon). \quad (24)$$

Из уравнения (20) и (21), находим параметры медленного скатывания для нашей модели со скалярным полем (12) и потенциалом (18)

$$\varepsilon(t) = \frac{1}{2} \frac{(B - \frac{3}{2} \alpha^2 \varphi_0^2 \cos(2\alpha t)(\frac{1}{4} \alpha^2 \varphi_0^2 t + H_0) + \frac{3}{8} \alpha^4 \varphi_0^4 t - \frac{3}{2} \alpha^2 \varphi_0^2 H_0)^2}{(A - \frac{3}{4} \varphi_0^2 \alpha \sin(2\alpha t)(\frac{1}{4} \varphi_0^2 \alpha^2 t - H_0) + \frac{3}{2} \alpha^2 \varphi_0^2 t(\frac{1}{8} \varphi_0^2 \alpha^2 t - H_0) - \frac{1}{2} \varphi_0^2 \alpha^2 + 3H_0^2)^2 \alpha^2 \varphi_0^2 \sin^2(\alpha t)}. \quad (25)$$

где были введены дополнительные обозначения

$$A = -\frac{3}{16} \cos^4(\alpha t) \alpha^2 \varphi_0^4 + \frac{1}{2} \cos^2(\alpha t) \alpha^2 \varphi_0^2 (\frac{3}{8} \varphi_0^2 + 1),$$

$$B = \frac{3}{4} \cos^3(\alpha t) \alpha^3 \varphi_0^4 \sin(\alpha t) - \frac{1}{2} \alpha^3 \varphi_0^2 \sin(2\alpha t) (\frac{3}{4} \varphi_0 - 1).$$

$$\eta(t) = \frac{C + 3\alpha^3 \varphi_0^2 \sin(2\alpha t)(\frac{1}{4} \alpha^2 \varphi_0^2 t - H_0)}{\varphi_0^2 \alpha^2 \sin^2(\alpha t)} \quad (26)$$

$$+ \frac{D - \frac{3}{2} \alpha^4 t \varphi_0^3 H_0 \cos(\alpha t) - \frac{3}{2} \alpha^2 \varphi_0^2 H_0 - \cos(\alpha t)}{\varphi_0^3 \cos^3(\alpha t) + 3\varphi_0^2 \cos^2(\alpha t) \beta + 3\varphi_0 \cos(\alpha t) \beta^2 + \beta^3}.$$

где были введены дополнительные обозначения

$$C = -\frac{9}{4} \alpha^4 \varphi_0^4 \cos^2(\alpha t) \sin^2(\alpha t) + \frac{3}{4} \alpha^4 \varphi_0^4 \cos^4(\alpha t) - \varphi_0^2 \alpha^4 \cos(2\alpha t) (\frac{9}{8} \varphi_0^2 + 1),$$

$$D = \frac{3}{4} \cos^4(\alpha t) \alpha^5 \varphi_0^5 \sin(\alpha t) - \frac{1}{2} \varphi_0^3 \alpha^5 \sin(2\alpha t) \cos(\alpha t) (\frac{3}{4} \varphi_0^2 + 1) - \frac{3}{2} \varphi_0^3 \alpha^4 \cos(\alpha t) \cos(2\alpha t) (\frac{1}{4} \varphi_0^2 \alpha^2 t - H_0).$$

На рисунке 5 показана зависимость наклона потенциала ε от времени t . Как видно из рисунка при больших t , $\varepsilon \ll 1$ т.е. выполняется условие возникновения инфляции.

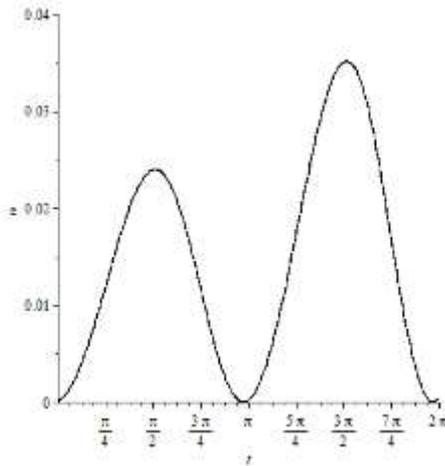


Рисунок 5- Зависимость наклона потенциала ε от времени t

Пример 2. Для изучения инфляционного сценария выберем потенциал в степенном виде В качестве первого примера инфляционного сценария мы возьмем одну из простейших моделей, принимая потенциал в степенном виде

$$V(\varphi) = \lambda \varphi^n, \quad (27)$$

где λ – константа связи, n – константа. Из

определений ε_V и η_V в уравнениях (20) и (21) соответственно, получаем следующие параметры медленного скатывания:

$$\varepsilon_V = \frac{n^2}{2k\varphi^2}, \eta_V = \frac{n(n-1)}{k\varphi^2}. \quad (28)$$

Поскольку инфляция закончивается когда $\varepsilon_V(\varphi_{end}) = 1$, то $\varphi_{end} = \frac{n}{\sqrt{2k}}$. Следовательно, е-фолдинг можно вычислить из

$$N = \int_{t_1}^{t_2} H dt = \int \frac{H}{\dot{\varphi}} d\varphi \approx k \int_{\varphi_{end}}^{\varphi} \frac{V(\varphi')}{V_\varphi(\varphi')} d\varphi'. \quad (29)$$

Подставляя (27) в (29) уравнение выводим е-фолдинг

$$N = \frac{k}{2n} (\varphi^2 - \frac{n^2}{2k}). \quad (30)$$

Таким образом, параметры медленного скатывания в терминах N равны

$$\varepsilon_V = \frac{n}{4N + n}, \eta_V = \frac{2(n-1)}{4N + n}. \quad (31)$$

На рисунке 6 показана зависимость параметра медленного скатывания ε_V , η_V от величины е-фолдинга при $n = 3$.

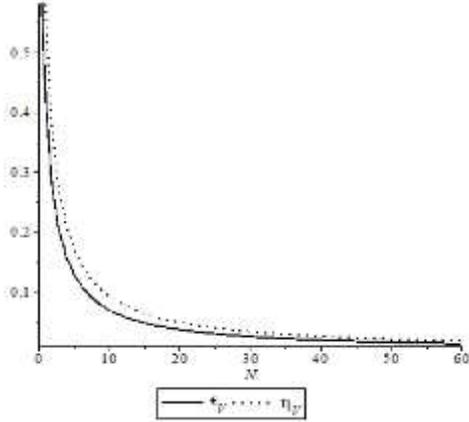


Рисунок 6- Зависимость параметр медленного скатывания ε_V , η_V от величины е-фолдинга

Спектральные индексы для этой модели находятся из

$$n_s - 1 \approx 2\eta_V - 6\varepsilon_V = -\frac{2(n+2)}{4N+n}, \quad (32)$$

$$n_T \approx -2\varepsilon_V = -\frac{2n}{4N+n}, \quad (33)$$

$$r \approx 16\varepsilon_V = \frac{16n}{4N+n}. \quad (34)$$

На рисунке 7 показана зависимость спектральных индексов n_s, n_T, r через параметры медленного скатывания от величины е-фолдинга.

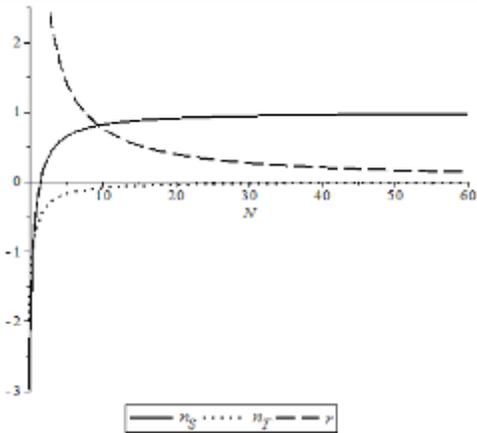


Рисунок 7- Зависимость спектральных индексов n_s, n_T, r через параметры медленного скатывания от величины е-фолдинга

Согласно наблюдательным данным Planck значения скалярного спектрального индекса и тензорно- скалярного отношения должны находиться в диапазоне [20]

$$n_s = 0,9649 \pm 0,0042, \quad (68\% CL), \quad (35)$$

$$r < 0.056. \quad (95\% CL). \quad (36)$$

Как видно из рисунка 7 полученные нами результаты хорошо согласуются с результатами наблюдений Planck.

Заключение

Исследовали космологическую модель со скалярным полем совместно с однородной и изотропной метрикой Фридмана-Леметра-Робертсона-Уокера. Используя уравнение Эйлера-Лагранжа построили эволюционные уравнения модели. В первом примере построили решение полученных уравнений движения, задав динамику скалярного поля в виде тригонометрической функции. В выбранном нами решении скалярное поле изменяется периодически, то убывая, то возрастая. В период возникновения инфляции скалярное поле должно медленно скатываться вниз. Поэтому для изучения инфляционного периода эволюции Вселенной мы выбрали участок при $0 < t < 2\pi$, на котором скалярное поле убывает. Полученное решение масштабного фактора экспоненциально изменяется во времени. Из построенного графика видно, что за малый промежуток времени происходит резкое возрастание масштабного фактора, что хорошо согласуется с инфляционными теориями. Для дальнейшей верификации исследуемой модели нашли параметры медленного скатывания и построили их графики, из которых можно увидеть выполнение условия возникновения инфляции $0 < \varepsilon \ll 1$. Во втором примере для изучения инфляционного сценария задали скалярный потенциал в степенном виде. Нашли зависимость параметров медленного скатывания от величины е-фолдинг N и спектральные индексы. Полученные решения полностью согласуются с инфляционной теорией и наблюдательными данными Planck.

Благодарность

Исследование выполнено при финансовой поддержке Комитета науки Министерства образования и науки Республики Казахстан (грант № AP09058240).

Литература

- 1 Kucukakca Y. Scalar tensor teleparallel dark gravity via Noether symmetry //The European Physical Journal C. – 2013. – Vol.73. – Art.No 2327.
- 2 Cai Y.F., Capozziello S., De Laurentis M., Saridakis E.N. $f(T)$ teleparallel gravity and cosmology //Reports on Progress in Physics. – 2016. – Vol.79. – P.106901.
- 3 Razina O, Tsyba P, Meirbekov B, Myrzakulov R Cosmological Einstein–Maxwell model with g-essence //International Journal of Modern Physics D. – 2019. – Vol.28, No10. – Art.No 1950126.
- 4 Godani N., Gauranga C. Samanta. FRW cosmology in $f(Q,T)$ gravity //International Journal of Modern Physics D. – 2021. – Vol. 18, No. 09. – Art.No 2150134.
- 5 Esmakhanova K., Myrzakulov N., Nugmanova G., Myrzakulov Y., Chechin L., Myrzakulov R. Dark energy in some integrable and nonintegrable FRW cosmological models //International Journal of Modern Physics D. – 2011. – Vol. 20, No. 12. – P. 2419-2446.
- 6 Wei H., Guo X.-J., Wang L.F. Noether Symmetry in $F(T)$ Theory //Physics Letters B. – 2012. – Vol.707, №2. – P.298-304.
- 7 Capozziello S., Frusciante N., Vernieri D. New spherically symmetric solutions in $f(R)$ –gravity by Noether symmetries //General Relativity and Gravitation. – 2012. – Vol.44. – P.1881–1891.
- 8 Bhardwaj V.K., Pradhan A. Evaluation of cosmological models in gravity in different dark energy scenario //New Astronomy. – 2022. – Vol. 91. – Art.No 101675.
- 9 Cid M.A., del Campo S., Herrera R. Warm inflation on the brane //Journal of Cosmology and Astroparticle Physics 10. – 2007. – Vol. 2007. – Art.No 005.
- 10 Gudekli E., Myrzakulov N., Yerzhanov K., Myrzakulov R. Trace-anomaly driven inflation in $f(T)$ gravity with a cosmological constant //Astrophysics and Space Science. – 2015. – Vol.357. – Art.No 45.
- 11 Guth A.H. Inflationary universe: A possible solution to the horizon and flatness problems //Physical Review D. – 1981. – Vol.23, No2. – P.347-356.
- 12 Linde A. Chaotic Inflation //Physics Letters B. – 1983. – Vol.129. – P.177-181.
- 13 Jaman N., Myrzakulov K. Braneworld inflation with an effective ϕ -attractor potential //Phys. Rev. D 99. – 2019. – Art.No 103523.
- 14 Berera A. Warm Inflation in the Adiabatic Regime- a Model, an Existence Proof for Inflationary Dynamics in Quantum Field Theory //Nuclear Physics B. – 2000. – V.4. – P.666-714.
- 15 Myrzakul Sh., Myrzakulov R. Lorenzo Sebastiani. $f(\varphi)$ R-models for inflation //International Journal of Modern Physics D. – 2016. – Vol.25, No 04. – Art.No 1650041.
- 16 Bartrum S., Bastero-Gil M., Berera A., Cerezo R., Ramos R. O., Rosa J. G. The importance of being warm (during inflation) //Physics Letters B. – 2014. – Vol.732. – P.116-121.
- 17 Modak B., Kamilya S. Gravitational coupling function in scalar tensor theories //International Journal of Modern Physics A. – 1998. – Vol.13. – P.3915-3927.
- 18 Almeida T.S., Pucheu M.L., Romero C., From Brans-Dicke gravity to a geometrical scalar-tensor theory //Physical Review D. – 2014. – Vol.89. – Art.No 64047.
- 19 Мырзакулова Ш.А., Разина О.В., Темирбаев М.Ш. Точное аналитическое решение динамических уравнений модели скалярного поля //Вестник Евразийского национального университета им. Л.Н. Гумилева. Серия Физика. Астрономия. – 2021. – Т.137, №4. – С.15-23.
- 20 Gamonal M. Slow-roll inflation in $f(R,T)$ gravity and a modified Starobinsky-like inflationary model //General Relativity and Quantum Cosmology. – 2021. – Vol.31. – Art.No 100768.

References

- 1 Y. Kucukakca, The European Physical Journal C. 73, 2327 (2013).
- 2 Y.F. Cai, et al., Rep. Prog. Phys., 79, 106901 (2016).
- 3 O. Razina, et al., Int.J.Mod.Phys. D, 28(10), 1950126 (2019).
- 4 Nisha Godani, C. Gauranga Samanta, Int.J.Mod.Phys. D, 18(09), 2150134 (2021).
- 5 K. Esmakhanova, et al., Int.J.Mod.Phys. D, 20(12), 2419-2446 (2011).
- 6 H.Wei, X.-J.Guo, L.F.Wang, Phys. Letters B, 707(2), 298-304 (2012).
- 7 S.Capozziello, et al.,General Relativity and Gravitation, 44, 1881–1891 (2012).
- 8 Vinod Kumar Bhardwaj, Anirudh Pradhan, New Astronomy. 91, 101675 (2022).
- 9 M.A. Cid, S.del Campo, R. Herrera, JCAP, 2007, 005 (2007).
- 10 E. Gudekli, et al., Astrophys. Space Sci, 357, 45 (2015).
- 11 A.H. Guth, Phys. Rev. D, 23, 347-356 (1983).

- 12 A.Linde. Phys. Letters B, 129, 177-181 (1983).
- 13 Nur Jaman, K. Myrzakulov, Phys. Rev. D, 99, 103523 (2019).
- 14 A. Berera, Nuclear Physics B, 4, 666-714 (2000).
- 15 Sh. Myrzakul, R. Myrzakulov, L. Sebastiani, Int.J.Mod.Phys. D, 25 (04), 1650041 (2016).
- 16 S. Bartrum, et al., Phys. Letters B. 732, 116-121 (2014).
- 17 B. Modak, S. Kamilya, Int.J.Mod.Phys. A, 13, 3915 (1998).
- 18 T.S. Almeida, M.L. Pucheu, C. Romero, Phys. Rev. D. 89, 64047 (2014).
- 19 S.A. Myrzakulova, et al., Bulletin of L.N. Gumilyov Eurasian National University. Physics. Astronomy Series, 137(4), 15-23 (2021). (In Russ).
- 20 M. Gamonal, GR-QC, 31, 100768 (2021).

2-бөлім

ПЛАЗМА ФИЗИКАСЫ

Section 2

ФИЗИКА ПЛАЗМЫ

Раздел 2

PLASMA PHYSICS

МРНТИ 29.27.03

<https://doi.org/10.26577/RCPH.2022.v81.i2.04>Ю.В. Архипов* , А.Б. Ашиқбаева , А. Асқарұлы ,А.Е. Давлетов , А.Б. Еркін 

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

*email: yarkhipov@yahoo.ca

ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИЧЕСКОГО СТРУКТУРНОГО ФАКТОРА БИНАРНЫХ ИОННЫХ СМЕСЕЙ

С использованием метода моментов исследованы и проанализированы динамические характеристики плотных систем, состоящих из ионов двух сортов с различной массой и зарядами, и соответствующего зарядам ионов количества экранирующих электронов. В настоящей работе обсуждаются характеристики бинарной ионной смеси, массы компонентов которой отличаются в два раза. В рамках развитого авторами метода моментов рассчитаны динамические структурные факторы (ДСФ) такой плазмы для различных термодинамических параметров. Алгоритм расчетов при этом основан на использовании с одной стороны статического структурного фактора системы, определяющегося из решения уравнения Орнштейна – Цернике, а с другой – так называемой функции-параметра Неванлинны (ФПН), входящей в расчетные соотношения. Последняя может быть найдена расчетным путем с использованием моментов функции потерь системы. Вычисления проводились в рамках классической системы заряженных частиц, взаимодействующих по закону Кулона. В работе проведен анализ полученных данных при использовании различных методов расчета ФПН. Полученные в работе результаты качественно и количественно согласуются с данными теоретических расчетов и численных экспериментов авторов других исследований динамических свойств плотной многокомпонентной плазмы.

Ключевые слова: бинарная-ионная смесь, метод моментов, моменты, динамический структурный фактор.

Ю.В. Архипов*, Ә.Б. Ашықбаева, Ә. Асқарұлы, А.Е. Давлетов, А.Б. Еркін
Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, ЭТФЭИ, Қазақстан, Алматы қ.

*email: yarkhipov@yahoo.ca

Бинарлы иондық қоспалардың динамикалық құрылымдық факторын зерттеу

Моменттер әдісі көмегімен әртүрлі массалары мен зарядтары бар екі типті иондардан және иондардың зарядтарына сәйкес келетін экрандалған электрондардан тұратын тығыз жүйелердің динамикалық сипаттамаларын зерттеу және талдау жүргізілді. Бұл жұмыста біз құрамдас массалары екі есе ерекшеленетін екілік иондық қоспаның сипаттамаларын талқылаймыз. Авторлар әзірлеген момент әдісінің шеңберінде мұндай плазманың динамикалық құрылымдық факторлары (ДҚФ) әртүрлі термодинамикалық параметрлер үшін есептеледі. Бұл жағдайда есептеу алгоритмі, бір жағынан, Орнштейн-Цернике теңдеуінің шешімінен анықталатын жүйенің статикалық құрылымдық факторын, ал екінші жағынан, деп аталатынды қолдануға негізделген. Неванлинна параметрлік функциясы (НПФ), ол есептелген қатынастарға кіреді. Соңғысын жүйенің шығындалу функциясының моменттері арқылы табуға болады. Есептеулер Кулон заңы бойынша әрекеттесетін зарядталған бөлшектердің классикалық жүйесі шеңберінде жүргізілді. Жұмыста Неванлинна параметрлік функцияны есептеудің әртүрлі әдістерін қолдану арқылы алынған мәліметтер талданады. Бұл жұмыста алынған нәтижелер тығыз көпкомпонентті плазманың динамикалық қасиеттерінің басқа зерттеулері авторларының теориялық есептеулері мен сандық тәжірибелерінің мәліметтерімен сапалық және сандық жағынан сәйкес келеді. Бұл жұмыста ДҚФ алынған нәтижелері басқа авторлардың молекулалық динамика әдісімен алынған мәліметтермен салыстырылады.

Түйін сөздер: екілік-иондық қоспа, момент әдісі, момент, динамикалық құрылым факторы.

Yu.V. Arkhipov*, A.B. Ashikbayeva, A. Askaruly, A.E. Davletov, A.B. Yerkin
 Al-Farabi Kazakh National University, IETP, Kazakhstan, Almaty
 *email: yarkhipov@yahoo.ca

Investigation of the dynamic structural factor of binary ionic mixtures

The method of moments is used to investigate and analyze the dynamic characteristics of dense systems consisting of ions of two types with different masses and charges, and the number of screening electrons corresponding to the charges of the ions. In this paper, we discuss the characteristics of a binary ionic mixture whose component masses differ by a factor of two. Within the framework of the developed self-consistent method of moments, the dynamic structure factors (DSF) of such a plasma are calculated for various thermodynamic parameters. In this case, the calculation algorithm is based on the use, on the one hand, of the static structural factor of the system, which is determined from the solution of the Ornstein-Zernike equation, and on the other hand, the so-called Nevanlinna parameter function (NPF), which is included in the calculated relations. The calculations were carried out within the framework of the classical system of charged particles interacting according to the Coulomb law. The paper analyzes the data obtained using various methods for calculating the NPF. The results obtained in this work qualitatively and quantitatively agree with the data of theoretical calculations and numerical experiments of the authors of other studies of the dynamic properties of a dense multicomponent plasma.

Keywords: binary-ionic mixture, method of moments, moments, dynamic structure factor.

Введение

В связи с развитием исследований плазмы, формирующейся в реакторах управляемого термоядерного синтеза, возникает необходимость определения ее диэлектрических свойств и динамических характеристик. Как правило, в плазме имеются ионы различных газов. Поэтому возникает необходимость в проведении экспериментальных и расчетно-теоретических исследований, в которых исследуются системы заряженных частиц, состоящие из двух и более компонентов. В настоящей работе исследуется динамический структурный фактор бинарной ионной смеси, которая состоит из ядер атомов водорода H^+ и гелия He^+ с нейтрализующим электронным фоном. Вычисление динамического структурного фактора ее проводится в рамках развитого в [1-5] метода моментов, в котором статические характеристики системы заряженных частиц находятся из решения уравнения Орнштейна-Цернике в гиперцепном приближении [6-13]. Входящая в расчетные соотношения функция-параметр Неванлинны (ФПН) находится из вычисляемых частотных моментов. Полученные результаты приводятся в сравнении с данными работ [14 - 15].

Рассмотрим бинарную ионную смесь, находящуюся в тепловом равновесии, состоящую из двух видов ионов с массами, плотностью и положительными зарядами соответственно m_1, n_1, Z_1 и m_2, n_2, Z_2 . Система помещена в объем V так, что $n_a = N_a / V$, где N_a число частиц сорта a , где

$a = 1, 2$. С точки зрения статистики система классическая и имеется отрицательный нейтрализующий фон. Всего в системе $N = N_1 + N_2$ частиц с общей концентрацией $n = n_1 + n_2$ так что относительная плотность равна:

$$N_{21} = \frac{N_2}{N_1} = \frac{n_2}{n_1}.$$

Тогда свойства системы будут зависеть только от следующих соотношений:

$$Z_{21} = \frac{Z_2}{Z_1}, \quad M_{21} = \frac{m_2}{m_1}.$$

В данной работе рассматривается классическая плазма, состоящая из двух сортов иона (ядра атомов водорода H^+ и гелия He^+), равных концентраций, так что выполняется равенство $N_{21} = 1$.

В качестве потенциала межчастичного взаимодействия используем потенциал Кулона

$$\varphi_{ab}(r) = \frac{Z_a Z_b e^2}{r}, \quad (1)$$

а для описания состояния плазмы – параметр связи

$$\Gamma = \frac{e^2}{ak_B T}. \quad (2)$$

Здесь введен радиус Вигнера-Зейтца

$$a = \sqrt[3]{3/4\pi n}, \quad (3)$$

где e – заряд электрона, k_B – постоянная Больцмана, T – температура, n – общая концентрация частиц.

Метод моментов для бинарной-ионной смеси

Как известно, использование метода моментов позволяет определить диэлектрические свойства кулоновской системы, используя несколько первых моментов функции потерь (см. ниже (6)), которые можно рассчитать, зная потенциал межчастичного взаимодействия и статические структурные факторы $S_{ab}(k)$. Последний может быть вычислен из решения уравнения Орнштейна-Цернике в гиперцепном приближении [4-9], как это и было сделано в данной работе, для плазмы, содержащей ионы двух сортов.

Запишем формулу Неванлинны, определяющую диэлектрические свойства среды, в виде [3]

$$\frac{1}{\varepsilon(k, \omega)} = 1 + \frac{\omega_p^2(\omega + Q(k))}{\omega(\omega^2 - \omega_2^2) + Q(k)(\omega^2 + \omega_1^2)}, \quad (4)$$

здесь $\omega_1^2 = C_2(k)/C_0(k)$, $\omega_2^2 = C_4(k)/C_2(k)$,

$Q(k) = ih_0(k)$, где $h_0(k) = \frac{\omega_2^2(k)}{\sqrt{2\omega_1(k)}}$, была найдена в

работе [16] и успешно использована в ряде следующих работ [17-21].

Параметры $C_\nu(k)$ определены как частотные моменты положительной четной функции потерь $L(k, \omega)$

$$C_\nu(k) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \omega^\nu L(k, \omega) d\omega, \quad \nu = 0, 2, 4. \quad (5)$$

Здесь использовано обозначение для функции потерь

$$L(k, \omega) = -\frac{\text{Im} \varepsilon^{-1}(k, \omega)}{\omega}. \quad (6)$$

Нулевой частотный момент в классическом приближении выразится следующим образом

$$C_0(k) = \frac{n\tilde{\varphi}(k)}{k_B T} S_{zz}(k), \quad n = \sum_a n_a, \quad \tilde{\varphi}(k) = \frac{4\pi e^2}{k^2}, \quad (7)$$

в свою очередь $S_{zz}(k)$ определяется как

$$S_{zz}(k) = \frac{1}{n} \left(\sum_a n_a Z_a^2 + \sum_{a,b} n_a n_b Z_a Z_b \tilde{f}_{ab}(k) \right), \quad (8)$$

где $\tilde{f}_{ab}(k)$ – Фурье-образ корреляционной функции.

Второй частотный момент функции потерь, согласно правилу f -сумм [2, 22-23], остается неизменным, он равен квадрату плазменной частоты системы:

$$C_2 = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \omega^2 L(k, \omega) d\omega \equiv \omega_p^2 = \sum_a \frac{4\pi Z_a^2 e^2 n_a}{m_a}. \quad (9)$$

Выражение для четвертого частотного момента с Фурье-образом эффективного потенциала межчастичного взаимодействия

$$\Phi_{ab}(k) = \frac{4\pi e^2}{k^2} \zeta_{ab}(k), \quad \zeta_{ab}(k) = \zeta_{ba}(k), \quad (10)$$

причем, в частности для потенциала Кулона форм-фактор $\zeta_{ab}(k) = Z_a Z_b$, $a, b = 1, 2$, запишется следующим образом

$$C_4(k) = \omega_p^4 (1 + K(k) + U(k) + H). \quad (11)$$

Здесь представлены энергетические соотношения для кулоновской плазмы

$$K(k) = 8\pi e^2 k^2 \sum_a \frac{Z_a^2 n_a}{m_a^2} E_{Ta}, \quad E_{Ta} = \frac{3}{2} k_B T_a, \quad (12)$$

$$U(k) = e^4 \sum_{a,b} \frac{Z_a}{m_a} \frac{Z_b}{m_b} n_a n_b \int_0^\infty q^2 \tilde{f}_{ab}(q) f(q, k) dq. \quad (13)$$

$$f(p, q) = \frac{10}{3} - 2 \frac{p^2}{q^2} + \frac{(p^2 - q^2)^2}{pq^3} \ln \left| \frac{p+q}{p-q} \right|. \quad (14)$$

Выражение для H симметризуется к следующему виду

$$H = -\frac{8\pi^2}{3} e^4 \sum_{a,b} \left(\frac{Z_b}{m_b} - \frac{Z_a}{m_a} \right)^2 Z_a Z_b n_a n_b f_{ab}(0). \quad (15)$$

Вычисления динамического структурного фактора

Динамический структурный фактор (ДСФ) «заряд-заряд» в классическом приближении напрямую связан с обратной продольной диэлектрической функцией плазмы посредством флуктуационно-диссипативной теоремы [24 - 25] как:

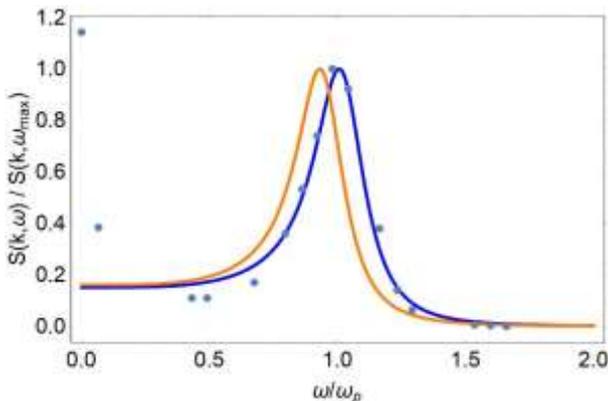
$$S_{zz}(k, \omega) = -\frac{\text{Im} \varepsilon^{-1}(k, \omega)}{\pi \beta \phi(k) \omega} \quad (16)$$

Откуда расчетная формула для ДСФ в данной работе, с использованием (4)-(7):

$$\frac{\pi S_{zz}(k, \omega)}{n S_{zz}(k)} = \frac{\omega_1^2(k)(\omega_2^2(k) - \omega_1^2(k))h_0(k)}{\omega^2(\omega^2 - \omega_2^2(k)) + h_0^2(k)(\omega^2 + \omega_1^2(k))} \quad (17)$$

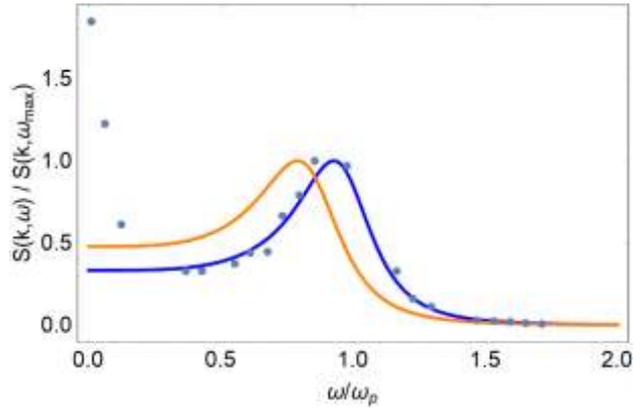
Как видно из формул, приведенных выше, для определения частот ω_1 , ω_2 нам необходимо знать статические характеристики системы (5). С другой стороны моменты и частоты ω_1 , ω_2 определялись из численного эксперимента [14-15] и использовались для расчета ДСФ по формуле (17).

На рисунках 1-3 приведены результаты вычисления ДСФ (17), где у оранжевой линии моменты и частоты ω_1 , ω_2 подсчитаны теоретически (соотношения (7,9,11)), а у синей линии они найдены из экспериментальных данных [14-15]. Обе эти зависимости сравнивались с экспериментальными данными (кружочки) [14-15], для различных параметров плазмы.



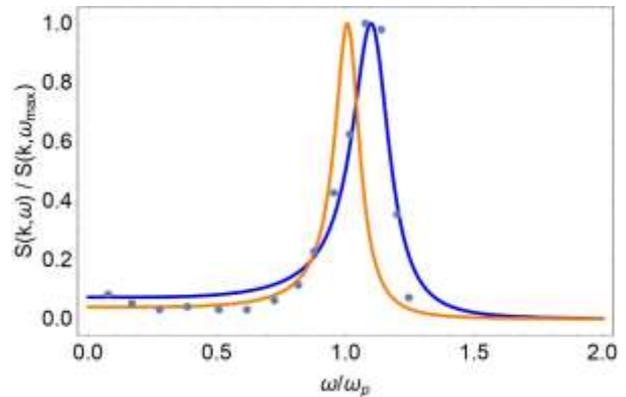
$$\Gamma = 24.5, q = ka = 1.384$$

Рисунок 1 – Динамический структурный фактор



$$\Gamma = 24.5, q = ka = 1.857$$

Рисунок 2 – Динамический структурный фактор



$$\Gamma = 40, q = ka = 0.875$$

Рисунок 3 – Динамический структурный фактор

Из рисунков 1-3 можно сделать вывод о том, что использование моментов из численных экспериментов для определения частот ω_1 , ω_2 и ФПН, позволяет более точно восстановить эти экспериментальные результаты, хотя и для случая вычисления моментов и соответствующих частот с использованием статических характеристик имеется определенное качественное согласие с данными [14-15].

Заключение

В данной работе были рассчитаны динамические структурные факторы методом моментов и сравнивались с численными данными других авторов. При этом моменты, частоты рассчитывались несколькими способами (о них говорится выше). В первом случае- моменты функции потерь, частоты и функция-параметр Неванлинны рассчитанные по формулам (7) – (15), дают неплохое качественное согласие с экспериментом, как это видно из рисунков 1-3 (оранжевые кривые). Во втором, когда моменты и

частоты, рассчитанные из экспериментальных данных, дают более качественное и количественное согласие с численным экспериментом (рисунки 1-3 синие кривые).

Благодарности

Исследование выполнено при финансовой поддержке Комитета науки Министерства образования и науки Республики Казахстан (грант № AP09260349).

Литература

- 1 Krein M.G., Nudel'man A.A. The Markov moment problem and extremal problems //Translations of Mathematical Monographs. American Mathematical Societ. – 1977. – Vol. 50. – 417 p.
- 2 Akhiezer N.I. The Classical Moment Problem. – New York: Hafner, 1965. – 253 p.
- 3 Tkachenko I.M., Arkhipov Yu.V., Askaruly A. The method of moments and its applications in plasma physics. – Germany: Lap Lambert Academic Publishing, 2012. – 125 p.
- 4 Adamyan V. M., Tkachenko I.M. Sum rules and exact relations for quantal Coulomb systems // Contrib. Plasma Phys. – 2003. – Vol. 43. – P. 252-257.
- 5 Arkhipov Yu. V., Askaruly A., Ballester D., Davletov A.E., Tkachenko I.M., Zwignagel G. Dynamic properties of one-component strongly coupled plasmas: The sum-rule approach // Phys. Rev. E. – 2010. – Vol. 81. – P. 026402-1–9.
- 6 Архипов Ю.В., Баимбетов Ф.Б., Давлетов А.Е., Стариков К.В. Псевдопотенциальная теория плотной высокотемпературной плазмы. – Алматы: Қазақ университеті, 2002. – 113 с.
- 7 Arkhipov Yu.V., Ashikbayeva A.B., Askaruly A., Davletov A.E., Tkachenko I.M. Optical properties of Kelbg-pseudopotential-modelled plasmas //14th Intern. Conf. on the Physics of Non-Ideal Plasmas Rostock. – 2012. – P. 126.
- 8 Arkhipov Yu.V., Ashikbayeva A.B., Askaruly A., Davletov A.E., Tkachenko I.M. Optical properties of Kelbg-pseudopotential-modelled plasmas //Contributions to Plasma Physics – 2013. – Vol.53. – P.375-384.
- 9 Arkhipov Yu.V., Ashikbayeva A.B., Askaruly A., Davletov A.E., Voronkov V.V., Tkachenko I.M. Statical structural properties of nonideal plasma //Int. j. math. phys. – 2013. – Vol.4, № 1. – P.80-84.
- 10 Arkhipov Yu.V., Ashikbayeva A.B., Askaruly A., Voronkov V.V., Davletov A.E., Tkachenko I.M. Static structural properties of nonideal plasmas // Международная научная конференция «Актуальные проблемы современной физики». – Алматы, 2013. – С.171.
- 11 Arkhipov Yu.V., Askaruly A., Ballester D., Davletov A.E., Meirkanova G.M., Tkachenko I. M. Collective and static properties of model two-component plasmas //Phys. Rev. E. – 2007. – Vol. 76. – Art.No 026403.
- 12 Arkhipov Yu. V., Ashikbayeva A.B., Askaruly A., Davletov A. E., Dubovtsev D., Tkachenko I.M. Enhancement of stopping power in dense two-component plasmas // Abstracts of Intern. Conf. on the Strongly Coupled Coulomb Systems. – Santa Fe; New Mexico; USA, 2014. – P.94.
- 13 Аскарулы А., Ашикбаева А.Б., Паласи Д. Энергетические потери релятивистских ионов в неидеальной плазме // Известия НАН РК серия физико-математическая – 2014. – Т. 2. – С.229-236.
- 14 Hansen J. P., McDonald I. R., Vieillefosse P. Statistical mechanics of dense ionized matter. VIII. Dynamical properties of binary ionic mixtures // Physical Review A – 1979. - Vol. 20. – N. 6. – P.2590.
- 15 Адамян С.В., Ткаченко И.М. Динамические корреляции в модельных ионных системах //Укр. физ. журн. – 1991. – Т.36, № 9. – С.1336-1340.
- 16 Arkhipov Yu.V., Askaruly A., Davletov A.E., Dubovtsev D.Yu., Donko Z., Hartmann P., Korolov I. Conde L. and Tkachenko I.M. Direct determination of dynamic properties of Coulomb and Yukawa one-component plasmas //Phys. Rev. Lett. – 2017. – Vol.119. – Art.No 045001.
- 17 Tkachenko I.M., Arkhipov Yu.V., Ashikbayeva A.B., Askaruly A., Davletov A.E., Dubovtsev D.Yu., Syzganbayeva S.A. Stopping power of warm dense electron plasmas //News and Reports from High Energy Density generated by Heavy Ion and Laser Beams. – June 2018. – P.53-54.
- 18 Arkhipov Yu.V., Askaruly A., Davletov A.E., Dubovtsev D.Yu., Tkachenko I.M. Dynamic characteristics of strongly coupled plasmas //16th Intern. Conf. on the Physics of Non-Ideal Plasmas. – France, 2018. – P.64.
- 19 Arkhipov Yu.V., Ashikbayeva A.B., Syzganbayeva S.A., Dubovtsev D.Yu., Tkachenko I.M. Charged-particle stopping in a classical electron gas //IX Intern. Conf. Plasma Physics And Plasma Technology. – Belarus, 2018. – P.68-70.
- 20 Архипов Ю.В., Аскарулы А., Ашикбаева А.Б., Дубовцев Д.Ю., Сызганбаева С.А., Мурсал Н., Ткаченко И.М. Динамические структурные факторы модельной неидеальной плазмы // Журнал проблем эволюции открытых систем. – 2018. – Вып.20. – Т.12. – С 82-87.
- 21 Ashikbayeva A.B., Askaruly A., Dubovtsev D.Yu. Comparative calculation of dynamic characteristics of moderately coupled plasmas using different dielectric function models //Вестник Кыргызско-Российского Славянского университета, серия естественно-технические науки. – 2019. – Т.19, № 8. – С.3-9.

- 22 Adamyan V.M., Tkachenko I.M. Sum rules and exact relations for quantal Coulomb systems // *Contrib. Plasma Phys.* – 2003. – Vol. 43. – P.252-257.
- 23 Arkhipov Yu.V., Ashikbayeva A.B., Askaruly A., Davletov A.E. and Tkachenko I.M. Dielectric function of coupled plasmas, the stopping power, and the sum rules // *Phys. Rev. E.* – 2014. – Vol. 90. – P. 053102.
- 24 Меирканова Г.М. Моментный подход к исследованию электродинамических характеристик модельной неидеальной плазмы // *Дисс. соискание акад. ст. PhD.* – 2008. – С.64.
- 25 Arkhipov Yu.V., Askaruly A., Ballester D., Davletov A.E., Tkachenko I.M., Zwicknagel G. Dynamic properties of one-component strongly coupled plasmas: The sum-rule approach // *Phys. Rev. E.* – 2010. – Vol. 81. – Art.No 026402.

References

- 1 M.G. Krein, A.A. Nudel'man, The Markov moment problem and extremal problems, *Translations of Mathematical Monographs*, (American Mathematical Society, 1977), 417 p.
- 2 N.I. Akhiezer, *The Classical Moment Problem*, (New York: Hafner, 1965), 253 p.
- 3 I.M. Tkachenko, Yu.V. Arkhipov, A. Askaruly, *The method of moments and its applications in plasma physics*, (Germany: Lap Lambert Academic Publishing, 2012), 125 p.
- 4 V.M. Adamyan, I.M. Tkachenko *Contributions to Plasma Physics*, 43, 252-257 (2003).
- 5 Yu. V. Arkhipov, A. Askaruly, D. Ballester, et.al. *Phys. Rev. E.*, 81, 026402 (2010).
- 6 Yu.V. Arkhipov, F.B. Baimbetov, A.E. Davletov and K. Starikov, *Pseudopotentsialnaja teorija plotnoi vysokotemperaturnoi plazmy*, (Almaty: Qazaq Universiteti, 2002), 113 p. (In Russ).
- 7 Yu.V. Arkhipov, et.al., 14th International Conference on the Physics of Non-Ideal Plasmas, Rostock, 126 (2012).
- 8 Yu.V. Arkhipov, et.al. *Contributions to Plasma Physics*, 53, 375-384 (2013).
- 9 Yu.V. Arkhipov, et.al. *Int. j. math. phys.*, 4 (1), 80-84 (2013).
- 10 Yu.V. Arkhipov, *Intern. Sci Conf "Actual problems of modern physics"*, Almaty, 171 (2013).
- 11 Yu.V. Arkhipov, et.al., *Phys. Rev. E*, 76, 026403 (2007).
- 12 Yu.V. Arkhipov, A.B. Ashikbayeva, A. Askaruly, et.al. *Abstracts of Intern. Conf. on the Strongly Coupled Coulomb Systems*, Santa Fe, 94 (2014).
- 13 A. Askaruly, A.B. Ashikbayeva, D. Palace *Proceedings of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan series of physical and mathematical*, 2, 229-236 (2014) (In Russ).
- 14 J.P. Hansen, I.R. McDonald, P. Vieillefosse, *Phys. Rev. A*, 20 (6), 2590 (1979).
- 15 S.V. Adamyan, I.M. Tkachenko, *Ukr. phys. J.*, 36 (9), 1336-1340 (1991). (In Russ)
- 16 Yu.V. Arkhipov, et.al., *Phys. Rev. Lett.*, 119, 045001 (2017).
- 17 I.M. Tkachenko, et.al., *News and Reports from High Energy Density generated by Heavy Ion and Laser Beams*, 53-54 (2018).
- 18 Yu.V. Arkhipov, et.al., 16th Intern. Conf. Phys. of Non-Ideal Plasmas, France, 64 (2018).
- 19 Yu.V. Arkhipov, et.al. IX Intern. Conf. Plasma Phys. & Plasma Tech., Belarus, 68-70 (2018).
- 20 Yu.V. Arkhipov, et.al., *Jurnal problem otkrytyh system*, 20 (12), 82-87 (2018). (In Russ)
- 21 A.B. Ashikbayeva et.al., *Bulletin of the Kyrgyz-Russian Slavic University, a series of natural and technical sciences*, 19 (8), 3-9 (2019).
- 22 V.M. Adamyan, I.M. Tkachenko, *Contrib. Plasma Phys*, 43, 252-257 (2003).
- 23 Yu.V. Arkhipov, et.al., *Phys. Rev. E*, 90, 053102 (2014).
- 24 G.M. Meirkanova, *Momentnyi podhod k issledovaniyu elektrodinamicheskikh harakteristik modelnoy neidealnoy plazmy* (Thesis PhD, Almaty, 2008), 64 p. (In Russ)
- 25 Yu. V. Arkhipov, et.al., *Phys. Rev. E.*, 81, 026402 (2010).

IRSTI 29.27.49

<https://doi.org/10.26577/RCPH.2022.v81.i2.05>

A.B. Tazhen* , M.K. Dosbolayev , T.S. Ramazanov 
IETP Al-Farabi Kazakh national university, Kazakhstan, Almaty
*email: aigerim_kz271295@mail.ru

PULSED PLASMA FLOW DIAGNOSTICS

This paper presents the results of optical and probe diagnostics of hydrogen plasma flow in a coaxial plasma accelerator. The triple probe and the Optosky ATP2000P linear spectrometer with a spectral range of 200-1100 nm were used for measuring the electron current and obtaining the hydrogen plasma emission spectrum. The individual spectral lines were observed using an M833 monochromator spectrometer with a spectral resolution of 0.024 nm. From the measured electron currents and emission spectrums, the electron densities in the flux of a hydrogen pulsed plasma were calculated. We used the Stark method of H_{β} hydrogen line broadening for calculations of electron densities. The obtained experimental results from the probe and spectroscopic measurements of electron density correspond well. In this work, we also obtained the dependence of the electron density on the voltages applied to the capacitor bank. The electron density increases with increasing voltage, because of the increased energy applied to the discharge. The average electron densities in the plasma flux showed $n_e = 1.13 \cdot 10^{21} \text{ m}^{-3}$, $n_e = 4.14 \cdot 10^{21} \text{ m}^{-3}$, and $n_e = 5.57 \cdot 10^{21} \text{ m}^{-3}$ at three values of voltages of 3 kV, 4 kV, and 5 kV, respectively.

Key words: coaxial plasma accelerator, hydrogen plasma flow, probe diagnostics, optical diagnostics, electron density, plasma emission spectrum

Ә.Б. Тәжен*, М.Қ. Досболаев*, Т.С. Рамазанов

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

*email: aigerim_kz271295@mail.ru

Импульстік плазмалық ағынның диагностикасы

Бұл жұмыста коаксиалды плазмалық үдеткіштегі сутегі плазмалық ағынының оптикалық және зондтық диагностикасының нәтижелері ұсынылған. Электрондық тоқты өлшеу және сутегі плазмасының эмиссиялық спектрлерін алу үшін үшэлектродты зонд және 200-1100 нм спектрлік диапазонда зерттеуге мүмкіндік беретін Optosky ATP2000P сызықтық спектрометрі қолданылды. Жеке спектрлік сызықтар 0,024 нм спектрлік ажыратқыштық қабілеті бар M833 монохроматор спектрометрінің көмегімен алынды. Өлшенген электрондық токтар мен алынған эмиссиялық спектрлер негізінде импульстік сутегі плазмасының ағынындағы электрондардың тығыздығы есептелді. Электрондардың тығыздығын есептеу үшін H_{β} сутегі спектрінің Штарктық кеңею әдісі қолданылды. Электрондардың тығыздығын зондтық және спектроскопиялық өлшеудің тәжірибелік нәтижелері жақсы сәйкес келді. Сонымен қатар бұл жұмыста электрондар тығыздығының конденсатор батареясына түсірілген кернеуге тәуелділігі де алынды. Кернеудің жоғарылауымен электрондардың тығыздығы да артады, бұл разрядқа берілген энергияның артуымен тығыз байланысты. 3 кВ, 4 кВ және 5 кВ кернеуінің үш мәні үшін плазмалық ағындағы электрондар тығыздығының орташа мәндері сәйкесінше $n_e = 1,13 \cdot 10^{21} \text{ м}^{-3}$, $n_e = 4,14 \cdot 10^{21} \text{ м}^{-3}$, және $n_e = 5,57 \cdot 10^{21} \text{ м}^{-3}$ құрады.

Түйін сөздер: коаксиалды плазмалық үдеткіш, сутегі плазмалық ағыны, зондтық диагностика, оптикалық диагностика, электрон тығыздығы, плазманың эмиссиялық спектрі

А.Б. Тажан, М.К. Досболаев, Т.С. Рамазанов

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

*email: aigerim_kz271295@mail.ru

Диагностика импульсного плазменного потока

В работе представлены результаты оптической и зондовой диагностики водородного плазменного потока в коаксиальном плазменном ускорителе. Для измерения электронного тока и получения

эмиссионных спектров водородной плазмы были использованы тройной зонд и соответственно линейный спектрометр Optosky ATP2000P со спектральным диапазоном 200-1100 нм. Отдельные спектральные линии были сняты с помощью спектрометра-монокроматора M833 со спектральным разрешением 0,024 нм. На основе измеренных электронных токов и отождествленных эмиссионных спектров были рассчитаны плотности электронов в потоке импульсной водородной плазмы. Для расчёта плотности электронов был использован метод Штарковского уширения водородных линий H_{β} . Полученные экспериментальные результаты зондового и спектроскопического измерения плотности электронов хорошо согласуются. В этой работе также была получена зависимость плотности электронов от приложенного к конденсаторной батарее зарядового напряжения. С увеличением зарядового напряжения увеличивается плотность электронов, что связано с увеличением энергии вложенной в разряд. При трех значениях зарядового напряжения 3 кВ, 4 кВ и 5 кВ, средние значения плотности электронов в плазменном потоке составили $n_e = 1,13 \cdot 10^{21} \text{ м}^{-3}$, $n_e = 4,14 \cdot 10^{21} \text{ м}^{-3}$, и $n_e = 5,57 \cdot 10^{21} \text{ м}^{-3}$, соответственно.

Ключевые слова: коаксиальный плазменный ускоритель, водородный плазменный поток, зондовая диагностика, оптическая диагностика, плотность электронов, эмиссионный спектр плазмы

Introduction

Pulsed plasma flows in plasma accelerators are widely used for solving some fundamental and practical problems. Particular interest among various applications of pulsed plasma flows represents fusion, and astrophysical researches [1-4]. For example, an experimental study of the interaction of pulsed plasma flow with materials [5]. The use of plasma flows for specific applications is determined by the formation, acceleration, and structure of the plasma plume. It depends on the geometry of the electrodes system, the way of filling and the type of used plasma-forming gas. A variety of plasma diagnostic methods are available to investigate the structure; processes caused by the formation and acceleration of the plasma flux. They are divided into contact and non-contact methods. The diagnostics of pulsed plasma flows is a difficult problem in comparison with stationary plasma. The complexity is the character of plasma that we study: high plasma velocity, short-lived plasma processes, high temperature. Nevertheless, regardless of this, the methods of diagnostics of no stationary flows of pulsed plasma such as the probe and optical and Interference methods exist. The electrical and magnetic probes are widely used among probe methods. The application of probe diagnostic methods is limited by perturbations induced in plasma. The optical methods have an advantage in comparison to probe methods and are used extensively in diagnostics. Its main advantage is the nonperturbative character. The optical and probe diagnostics of the pulse plasma flux was carried out in this work for measuring the electron density. This is important from a scientific and practical viewpoint for two reasons:

I In relation to the variety of applications of plasma flow;

II For understanding of plasma physics in plasma accelerators.

This work is organized as follows: the second and third chapters provide a brief overview of the experimental setup and plasma diagnostic methods; the fourth chapter contains an analysis and discussion of the experimental results; the fifth chapter consists of a conclusion.

Brief overview of the experimental setup

The optical and probe diagnostics of pulsed plasma flow was carried out in a coaxial plasma accelerator. This setup uses hydrogen as plasma-forming gas. The duration of a single pulse is an average of $\tau \sim 300 \mu\text{s}$. The main operating unit of the setup is the coaxial electrode system. The electrode system was placed in a vacuum chamber. A chamber is pre-pumped to a pressure of $\sim 10^{-5}$ Torr. The vacuum station for evacuating the vacuum chamber consists of a forevacuum and diffusion pump. Before the shot, the chamber is filled with plasma-forming gas. The experimental setup is powered by a capacitor battery with a capacitance of 1.4 mF. The pulse discharge in the interelectrode space is ignited when the vacuum arrester is turned on. The plasma is accelerated towards the output of the accelerator by the $\mathbf{J} \times \mathbf{B}$ force acting on plasma current bridging the electrodes. The schematic diagram and parameters of the experimental setup are described in detail in [6-8].

Brief overview of plasma diagnostic methods

The Optosky ATP2000P spectrometer with a spectral range of 200-1100 nm, and the M833 monochromator spectrometer with a spectral

resolution of 0.024 nm were used in this work for conducting probe and optical diagnostics of hydrogen plasma flow.

Hydrogen spectral line broadening is an important tool for optical diagnostics of plasma. Micro fields of electrons, ions, etc. in plasma cause various types of Stark broadening. One of the well-known Stark broadening of hydrogen lines by electrons is theoretically well studied and successfully used in practice. The relation between the spectral line half-width and the electron density is given by expression (1). This equation is used for diagnostic purposes for measuring the electron density.

$$\Delta\lambda_{1/2} = 2,50 \cdot 10^{-9} \alpha_{1/2} n_e^{2/3} \text{Å}, \quad (1)$$

where $\alpha_{1/2}$ – theoretical values of the half-width $\Delta\lambda_{1/2}$. The theoretical values of the half-width of the hydrogen line H_β are determined. In [9, 10] this method was applied to measure the electron density in the plasma flux.

The probe diagnostic methods have always been widely used for studying the properties of plasma and gaseous discharges. This method is a useful tool for local determination of the density, temperature of charged plasma particles and the space potential. Of known probe methods, triple probe allows measuring the local plasma parameters without external voltage sweep. This is particularly important in our case, because in pulsed plasma the discharges do not repeat from shot to shot. Moreover, this method allows measuring the temperature and electron density simultaneously in one shot. Another advantage is that using this method it is possible to obtain the temporal distribution of plasma parameters. The operation of a triple probe is as follows: three similar electrodes are located in plasma being studied. In voltage mode of operation, only V_{12} voltage is applied between two probes, and the third probe will be at floating potential V_{23} . Temperature and electron density are calculated according to equations (2) and (3):

$$kT_e = \frac{eV_{23}}{\ln 2}, \quad (2)$$

$$n_e = \frac{-I}{0,61Se \sqrt{\frac{kT_e}{m_i}}} \cdot \frac{\exp\left(-\frac{eV_{23}}{kT_e}\right)}{\left(1 - \exp\left(-\frac{eV_{23}}{kT_e}\right)\right)}, \quad (3)$$

where S is surface area of probes, m_i is ion mass, e is elementary charge, $I = \frac{V_{12}}{R_{shunt}}$ is ion saturation current. A triple probe method for measuring electron density in a plasma flux has been used in works [11, 12].

Analysis and discussion of the experimental results

The emission spectrum of the hydrogen plasma flux was obtained and analyzed in the 350-900 nm wavelength range by means of the Optosky ATP2000P linear spectrometer, it is shown in Fig. 1. As seen from this figure, the composition of the hydrogen plasma flux contains such impurities as iron, chromium, carbon, copper, hydrogen and residual air elements. The copper and iron, chromium, carbon are formed as a result of erosion of the electrode surface and the vacuum chamber wall.

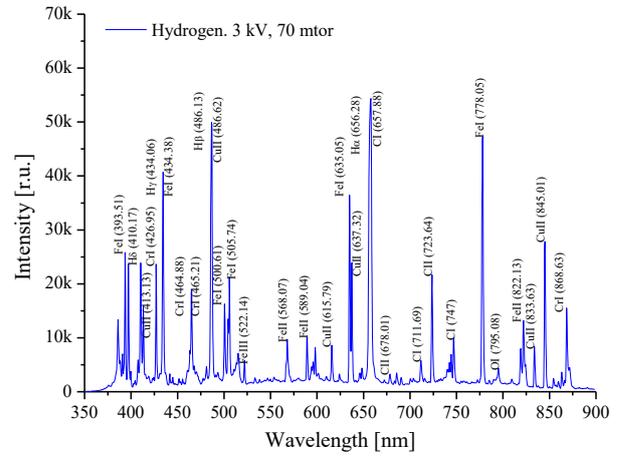


Figure 1 – Emission spectrum of the hydrogen plasma flux

A typical spectrum of the hydrogen line H_β was obtained at a pressure of 70 mTorr and at different values of voltages applied to the capacitor bank of 3-5 kV by using the spectrometer monochromator M833 with a spectral resolution of 0.024 nm (Fig. 2).

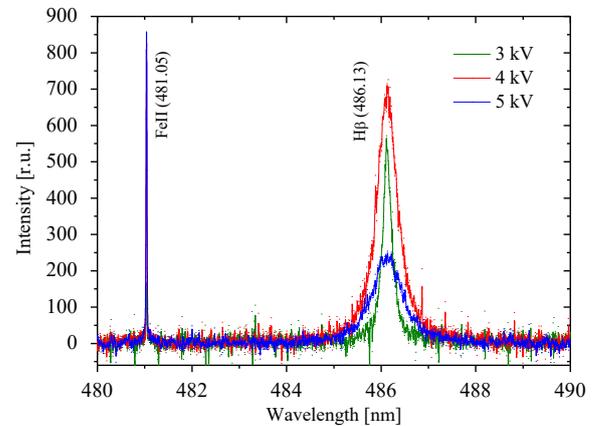


Figure 2 – Plasma flux spectrum in the H_β region

It can be seen that the half-width of the H_{β} line increases with increasing voltage applied to the capacitor bank. These indicate increasing electron density in plasma. This is caused by increasing the energy attached to the discharge. Averaged electron density for applied voltage of 3 kV is $n_e = 1.13 \cdot 10^{21} \text{ m}^{-3}$, for applied voltage of 4 kV is $n_e = 4.14 \cdot 10^{21} \text{ m}^{-3}$, for applied voltage of 5 kV is $n_e = 5.57 \cdot 10^{21} \text{ m}^{-3}$. The dependence of calculated electron density on applied voltage at gas pressure of 70 mTorr is shown in figure 3.

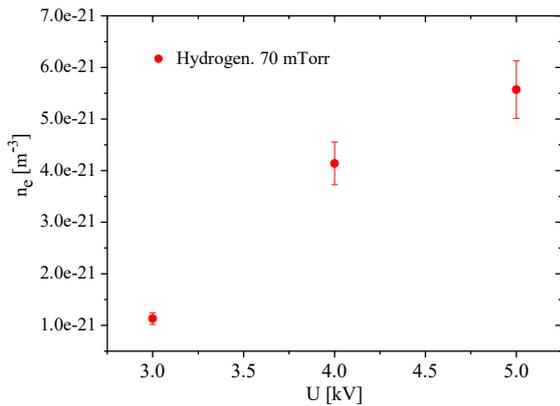


Figure 3 – The dependence of the electron density in the plasma flux on the voltage applied to the capacitor bank

The investigation of plasma flow using the triple probe method was performed at a capacitor bank voltage of 3 kV and a gas pressure of 70 mTorr. The probe was placed inside the vacuum chamber at a distance of 10 cm from the electrode system, and directed to plasma flow. The results of the measurements are shown in Figures 4 and 5.

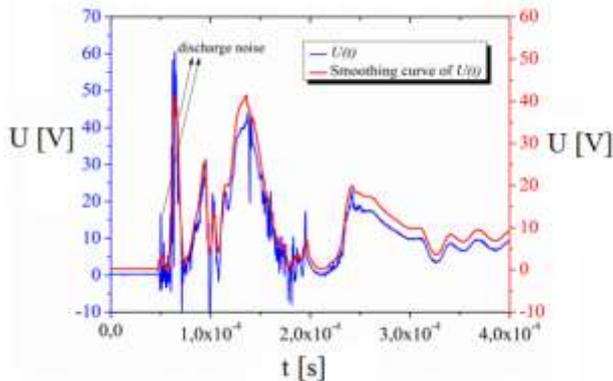


Figure 4 – Temporal characteristic of the floating potential and ion saturation current on the probe

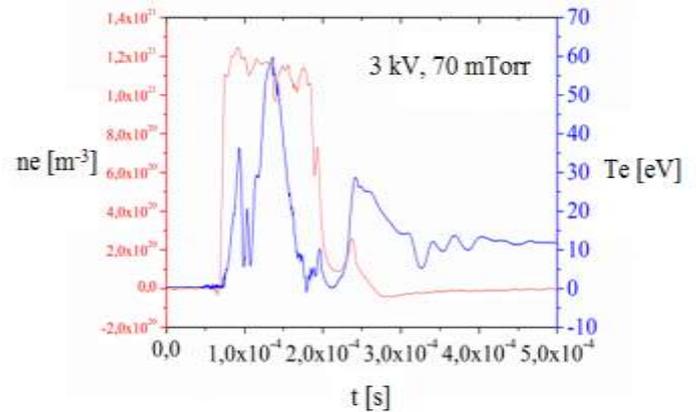


Figure 5 – Temporal characteristics of electron density and temperature

The obtained results by the Stark broadening method agree well with the results obtained by the probe method. As can be seen from Figures 3 and 5 the experimental results of electron density agree well.

Conclusion

Optical and probe diagnostics of the hydrogen plasma flux in a coaxial plasma accelerator were carried out. In particular, electron densities in the plasma flux were calculated by the Stark method of hydrogen line broadening and a triple electric probe. The obtained experimental results are in good agreement. The dependence of the electron density on the voltage applied to the capacitor bank was also obtained. It was found that with increasing voltage of charge, the energy attached to the gaseous discharge increases, and accordingly, the density of electrons increases. The temperature of electrons in the plasma flux was measured with a triple electric probe. The maximum value of the electron temperature was 60 eV at voltage of 3 kV and gas pressure in the vacuum chamber of 70 mTorr. Moreover, the time dependence of the temperature and electron density was obtained with the triple probe.

Funding

This research was funded by the Science Committee of the Ministry of Education and Science of the Republic of Kazakhstan (Grant No. AP09259081).

References

- 1 Garkusha I.E., Aksenov N.N., Byrka O.V., Makhraj V.A., Herashchenko S.S., Malykhin S.V., Petrov Yu.V., Staltsov V.V., Surovitskiy S.V., Wirtz M., Linke J., Sadowski M.J., Skladnik-Sadowska E. Simulation of plasma-surface interactions in a fusion reactor by means of QSPA plasma streams: recent results and prospects //Phys. Scr. – 2016. – Vol. 91. – Art.No 094001.
- 2 Lerner E., Hassan S., Karamitsos I., F.V. Roessel. Confined ion energy >200 keV and increased fusion yield in a DPF with monolithic tungsten electrodes and pre-ionization //Physics of Plasmas. – 2017. – Vol. 24. – Art.No 102708.
- 3 Yousefi H.R., Thornhill W., Sakai J.I., Nishino Y., Ito H., Masugata K. Dense plasma focus for laboratory astrophysics //Iranian Physical Journal. – 2009. – Vol. 2. – Art.No 17-20.
- 4 Dosbolayev M.K., Igibayev Zh.B., Tazhen A.B., Ramazanov T.S. Preliminary Study of the Solid-State Pulsed Plasma Thruster Model with Graphite as a Propellant //Plasma Physics Reports. – 2022. – № 48(3). – P.263-270.
- 5 Linsmeier Ch., Unterberg B., Coenen J.W., Doerner R.P., Greuner H., Kreter A., Linke J., Maier H. Material testing facilities and programs for plasma-facing component testing //Nuclear Fusion. – 2017. – Vol. 57. – Art.No 092012.
- 6 Tazhen A.B., Dosbolayev M.K. Measuring the self-generated magnetic field and the velocity of plasma flow in a pulsed plasma accelerator //Recent Contributions to Physics. – 2021. – № 2(77). – P.30-39.
- 7 Dosbolayev M., Raiymkhanov Zh., Tazhen A., Ramazanov T. Experimental Investigation of the Properties of Plasma-Dust Formations on Pulsed Plasma Accelerator //IEEE Transactions on Plasma Science. – 2019. – Vol. 47. – P.3047-3051.
- 8 Dosbolayev M.K., Tazhen A.B., Ramazanov T.S. Investigation and diagnostics of plasma flows in a pulsed plasma accelerator for experimental modelling of processes in tokamaks //Eurasian Journal of Physics and Functional Materials. – 2021. – Vol. 5. – P.198-210.
- 9 Wiechula J., Hock C., Iberler M., Manegold T., Schonlein A., Jacoby J. Experimental characterization of a coaxial plasma accelerator for a colliding plasma experiment //Physics of Plasmas. – 2015. – Vol. 22. – Art.No 043516.
- 10 Hong Y.J., Kwon G.Ch., Cho G., Shin H.M., Choi E.H. Measurement of Electron Temperature and Density Using Stark Broadening of the Coaxial Focused Plasma for Extreme Ultraviolet Lithography //IEEE Transactions on Plasma Science. – 2010. – Vol. 38. – P.1111-1117.
- 11 Borthakur S., Talukdar N., Neog N.K., Borthakur T.K. Study of plasma parameters in a pulsed plasma accelerator using triple Langmuir probe // Physics of Plasmas. – 2018. – Vol. 25. – Art.No 013532.
- 12 Yeong W., Ling L., Zhang Zh., Tang H., Liu X., Wang N. In-plume acceleration of leading-edge ions from a pulsed plasma thruster //Plasma Sources Sci. Technol. – 2018. – Vol. 27. – Art.No 104002.

References

- 1 I.E. Garkusha, et al., Phys. Scr. 91, 094001 (2016).
- 2 E. Lerner, et al., Physics of Plasmas 24, 102708 (2017).
- 3 H.R. Yousefi, et al., Iranian Physical Journal 2, 17-20 (2009).
- 4 M.K. Dosbolayev, et al., Plasma Physics Reports 48(3), 263-270 (2022).
- 5 Ch. Linsmeier, et al., Nuclear Fusion 57, 092012 (2017).
- 6 A.B. Tazhen, M.K. Dosbolayev, Rec.Contr.Phys., 2 (77), 30-39 (2021)
- 7 M. Dosbolayev, et al., IEEE Transactions on Plasma Science 47, 3047-3051 (2019).
- 8 M.K. Dosbolayev, et al., Eurasian j. phys. funct. mater., 5, 198-210 (2021).
- 9 J. Wiechula, et.al., Physics of Plasmas 22, 043516 (2015)
- 10 Y.J. Hong, et.al., IEEE Transactions on Plasma Science 38, 1111 – 1117 (2010).
- 11 S. Borthakur, et.al., Physics of Plasmas 25, 013532 (2018).
- 12 W. Yeong, et.al., Plasma Sources Sci. Technol. 27, 104002 (2018).

3-бөлім

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

Section 3

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

Раздел 3

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

МРНТИ 58.33.09; 58.33.19

<https://doi.org/10.26577/RCPH.2022.v81.i2.06>Ж.А. Заурбекова^{1*}, П.А. Блынский¹, Е.В. Чихрай¹, С.Қ. Әскербеков¹,А.У. Төлєнова¹, И.Е. Кєнжина^{1,2}, П.А. Бушнев³¹Әл-Фараби ат. Қазақ ұлттық университеті, Қазақстан, Алматы қ.²Satbayev University, Қазақстан, Алматы қ.³Зерттеу ортылығы «KazAlfaTech Ltd» Қазақстан, Алматы қ.

*email: zzha@physics.kz

SiC ҚАПТАМАСЫ БАР ЖТГР ГРАФИТИНІҢ СОЗЫЛМАЛЫ КОРРОЗИЯСЫ

Қазақстандық жоғары температуралы газбен салқындатылатын реакторды (ЖТГР) құру кезінде жақсартылған графиті және кремний карбиді (SiC) негізіндегі оның градиентті қорғаныс қаптамасы бар отынның әр түрі пайдаланылатын болады. Сондықтан, бұл жұмыстың мақсаты 1200K температурада және гелийдегі 200-250 кПа қысымындағы реактор графитінің және оның SiC қаптамасының ұзақ мерзімді жоғары температуралық коррозиясының жылдамдығы мен ерекшеліктерін су мен оттегінің қоспасына жақын концентрацияда, ЖТГР қалыпты жұмыс кезінде анықтау; жұмыс қоспасын берудің конвекциялық әдісімен коррозияға қарсы тәжірибенің сандық үлгісін жасау. Нәтижесінде, әрқайсысы 30 күнге созылатын төрт тізбекті сынақ кезеңі (коррозияның жалпы ұзақтығы 120 күн), таза графит үлгілерінің (SiC қаптамасы жоқ) әр өндірушіге байланысты 1,8%-дан 10,4%-ға дейін салмақ жоғалтуы байқалды. Жалпы, қорғалмаған графиттің коррозиясының орташа жылдамдығы әдебиеттегі деректерге сәйкес келеді. Графиттердің үстіне SiC қаптамасын қолданған үлгілердің коррозия жылдамдығы 100 - 500 есеге азаяды. Жасалған модель тәжірибе барысында ЖТГР графитінің жоғары температуралық коррозия процестерін де, қондырғының барлық көлемі бойынша барлық газ компоненттерінің масса алмасуының динамикасын да сипаттауға мүмкіндік береді.

Түйін сөздер: ЖТГР, графит, SiC қаптамасы, коррозия

Zh.A. Zaurbekova^{1*}, P.A. Blynskiy¹, Ye.V. Chikhray¹, S.K. Askerbekov¹,A.U. Tolonova¹, I.Ye. Kenzhina^{1,2}, P.A. Bushnev³¹Al-Farabi Kazakh National University, Kazakhstan, Almaty²Satbayev University, Kazakhstan, Almaty³Research center «KazAlfaTech Ltd», Kazakhstan, Almaty

*email: zzha@physics.kz

Long-term corrosion of HTGR graphite with SiC coating

When creating a Kazakhstani high-temperature gas-cooled reactor (HTGR), a type of fuel with improved graphite and its gradient protective coating based on silicon carbide (SiC) will be used.

So, the purpose of this work is determination the rate and features of the long-term high-temperature corrosion of reactor graphite and its SiC coating at a temperature of 1200K and a pressure of 200-250 kPa in helium with an admixture of water and oxygen in concentrations close to the normal operation of an HTGR; development a numerical model of a corrosion experiment with the convection method of supplying the working mixture. As a result, four successive test stages lasting 30 days each (the total duration of corrosion was 120 days), the weight loss of pure graphite samples (without SiC coating) range from 1.8% to 10.4%, depending on the manufacturer. In general, the average corrosion rate of unprotected graphite corresponds to the literature data. The use of a SiC coating over graphites reduces the corrosion rate of samples by a factor of 100-500. The developed model made it possible to describe both the high-temperature corrosion processes of HTGR graphite and the dynamics of the mass transfer of all gas components throughout the entire volume of the installation during the experiment.

Keywords: HTGR, graphite, SiC coating, corrosion

Ж.А. Заурбекова^{1*}, П.А. Блынский¹, Е.В. Чихрай¹, С.К. Аскербек¹,
А.У. Толенова¹, И.Е. Кенжина^{1,2}, П.А. Бушнев³

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

²Satbayev University, Казахстан, г.Алматы

³Исследовательский центр «KazAlfaTech Ltd», Казахстан, г.Алматы

*email: zzha@physics.kz

Долговременная коррозия графита ВТГР с SiC покрытием

При создании казахстанского высокотемпературного газоохлаждаемого реактора (ВТГР) будет использоваться разновидность топлива с улучшенным графитом и его градиентным защитным покрытием на основе карбида кремния (SiC). Поэтому, целью данной работы является определение скорости и особенности протекания длительной высокотемпературной коррозии реакторного графита и его SiC-покрытия при температуре 1200 К и давлении 200-250 кПа в гелии с примесью воды и кислорода в концентрациях, близких к нормальной работе ВТГР; разработка численной модели коррозионного эксперимента при конвекционном способе подачи рабочей смеси. В результате четыре последовательных этапов испытаний длительностью 30 дней каждый (общая длительность коррозии составила 120 дней) потери массы образцов чистого графита (без SiC-покрытия) составляют от 1,8 % до 10,4 % в зависимости от производителя. В целом средняя скорость коррозии незащищенного графита соответствует литературным данным. Применение SiC-покрытия поверх графитов снижает скорость коррозии образцов в 100-500 раз. Разработанная модель позволила описать как высокотемпературные процессы коррозии графита ВТГР так и динамику массопереноса всех газовых компонентов по всему объему установки за время эксперимента.

Ключевые слова: ВТГР, графит, SiC покрытие, коррозия

Кіріспе

Көміртектік энергияға көшудің жаһандық трендінде, әсіресе жылдам нейтронды реакторлар, сұйық металл реакторлары және жоғары температуралы газбен салқындатылған реакторлар (ЖТГР) сияқты тұжырымдамаларды дамытудағы жетістіктерді ескере отырып, атом энергетикасы әлі де маңызды сала болып табылады.

ЖТГР-ларда графит негізгі құрамдас материалдардың бірі болып есептелетін отынды пайдаланады. Отын элементтері графит пен кремний карбидінің (SiC) қабықшаларынан тұратын көп қабатты құрылымы бар шар тәрізді түрде (диаметрі ~1 мм) болады, оның ортасында уран диоксиді немесе карбид өзегі орналасқан [1, 2].

Коррозия процестерін, ЖТГР отынының графит негізінде, сонымен қатар SiC қаптамасында зерттеу реактордың қауіпсіз жұмысын негіздеу үшін маңызды міндет болып табылады. Сонымен қатар, қалыпты, бірақ ұзақ мерзімді жұмыс кезінде графит + SiC құрылымының деградация дәрежесін бағалау өте маңызды, өйткені кейбір мәліметтерге сәйкес [3] мұндай деградацияның механизмдері мен динамикасы сутегінің рөліне байланысты, коррозия өнімі ретінде айтарлықтай ерекшеленуі

мүмкін. Жұмыс температурасы мен қысымы жағдайында су буының саңылаулары мен жарықтарындағы графитпен және/немесе SiC-пен реакциялары кезінде пайда болатын сутегі беткі қабатына шығуға үлгермей, химиялық әрекеттесудің келесі процестеріне әсер етеді.

Материалдар мен әдістер

Ұзақ мерзімді коррозияға сынаққа арналған үлгілер Toyo Tenso, Tokai Carbon, IBIDEN және Nippon Techno-Carbon компанияларының Жапония атом энергиясы агенттігінің көмегімен жеткізілді. Тәжірибеде ұсақ түйіршікті IG-110 графитінің: әр өндірушіден бір қапталмаған графит үлгісі және SiC қаптамасы бар (қалыңдығы 100-150 мкм) 8 үлгісі зерттелді. Сәйкестендіру үшін үлгілер (A, B, C және D) ұзындығы бойынша аздап ерекшеленеді. SiC қаптамасы метилтрихлоросилан CH_3SiCl_3 пиролизі арқылы графитке қойылады [4]. Рентгендік фазалық талдау нәтижелері бойынша алынған қаптамасының құрылымы F43m (216) ғарыш тобының текше торы бар кремний карбидінің β -фазасына (3C-SiC) сәйкес келеді [5]. Үлгі өлшемдері $4 \times 4 \times (45-50)$ мм болатын параллелепипедтің пішініне ие болды.

Реакторлық графиттер үлгілерінің ұзақ мерзімді коррозияға сынақтары химиялық активті

газдардың реактор материалдарымен әрекеттесуін зерттеу үшін бұрын жасалған қондырғыда [5] жүргізілді, сонымен қатар бұл қондырғы ұзақ мерзімді сынақ үшін жаңартылды.

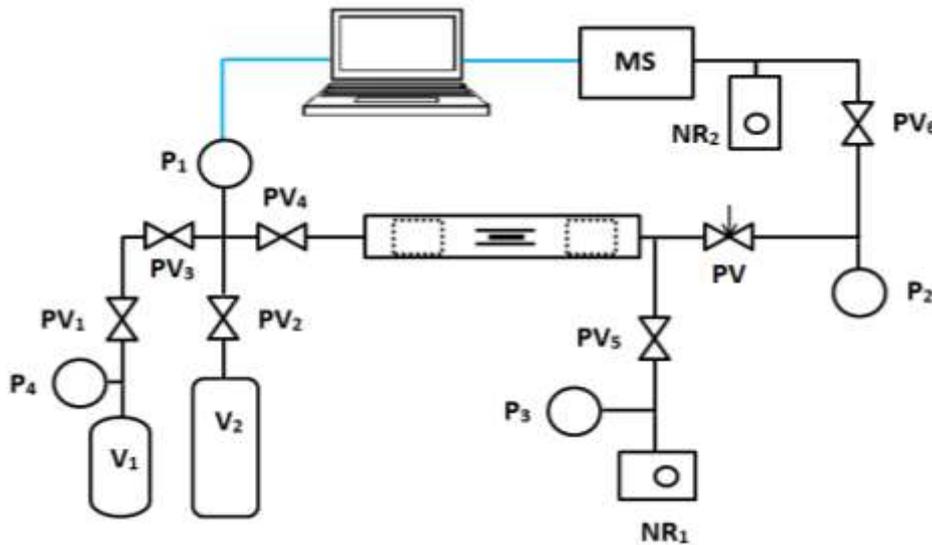
1-суретте пештің жұмыс камерасының бойлық қимасы мен өлшемдері, ал 2 және 3-суреттерде коррозияға қарсы қондырғының құрылымдық сұлбасы мен сыртқы түрі көрсетілген.



1-сурет – Коррозияға қарсы қондырғының жұмыс камерасының элементтерінің схемасы

Тәжірибе жүргізу үшін қыздыру аймағында 140 кПа артық қысымда (1200 К температурадағы қызу аймағында) белгіленген су мөлшері 0,1%-дан аспайтын жұмыс ортасы ретінде гелий қолданылады. Гелийдегі қоспалардың құрамы су буының 150 Па дейін парциалды қысымына және оттегінің 1-2 Паскалына сәйкес келеді. Ұзақ мерзімді тотығу тәжірибесін жүргізу үшін сыртқы суық шығыс-көзінен пештің ыстық аймағына гелий-бу қоспасын берудің конвекциялық әдісі қолданылады. Осы мақсатта төмен қысымды жұмыс қоспасының шығыс-көзі ретінде тәжірибенің газ-вакуумдық жүйесіне сыртқы

үлкен сыйымдылықты гелий цистернасы (40 литрлік қабылдағыш цилиндр) енгізілді. Алдын ала жүргізілген тәжірибелер мен сандық модельдеулердің нәтижелері көрсеткендей, гелийдің бірлескен конвекциялық-диффузиялық ысымалдануы шамамен 800 К температура айырмашылығы бар (пеште 1200 К және сыртқы қабылдағыш температурасында 300 К) екі аймақ арасында, эксперименттің бір кезеңіндегі 720 сағат (30 күн) ішінде бірнеше Па деңгейінде үлгілердің қыздыру аймағындағы су буының қысымын ұстап тұру үшін жеткілікті.



PV – механикалық ағытқыш; PV₁-PV₆ – вакуумдық клапан; P₁-P₄ – қысым датчигі; V₁ – гелий шары; V₂ – қабылдағыш (жұмыс қоспасы); NR₁, NR₂ – турбомолекулярлық сорғы; MS – масс-спектрометр

2-сурет – Коррозияны орнатудың құрылымдық схемасы [5]



3-сурет – Қоррозияға қарсы қондырғының сыртқы түрі

Үлгілерді коррозия камерасының ортасына орналастырады, содан кейін жүйе 0,01 торр қысымға дейін сорылады. Камера сорылғаннан кейін PV₄, PV₅ клапандары жабылады және гелий PV₁, PV₃ клапандарының көмегімен V₁ цилиндрінен V₂ қабылдағышқа құйылады. Осыдан кейін PV₁ және PV₃ клапандары жабылады және PV₄ клапанының көмегімен 130-140 кПа қысым деңгейіндегі газ қоспасы коррозия камерасына беріледі. Содан кейін коррозия камерасын қыздыру басталады (10 К/мин жылдамдықпен) және температура 1200 К-ге жеткенде термиялық тұрақтандыру режимі қосылады. Сынақ 4 кезеңге бөлінінеді, олардың әрқайсысы 30 күнге созылады. Әрбір кезең аяқталғаннан кейін үлгілер алынып өлшенеді.

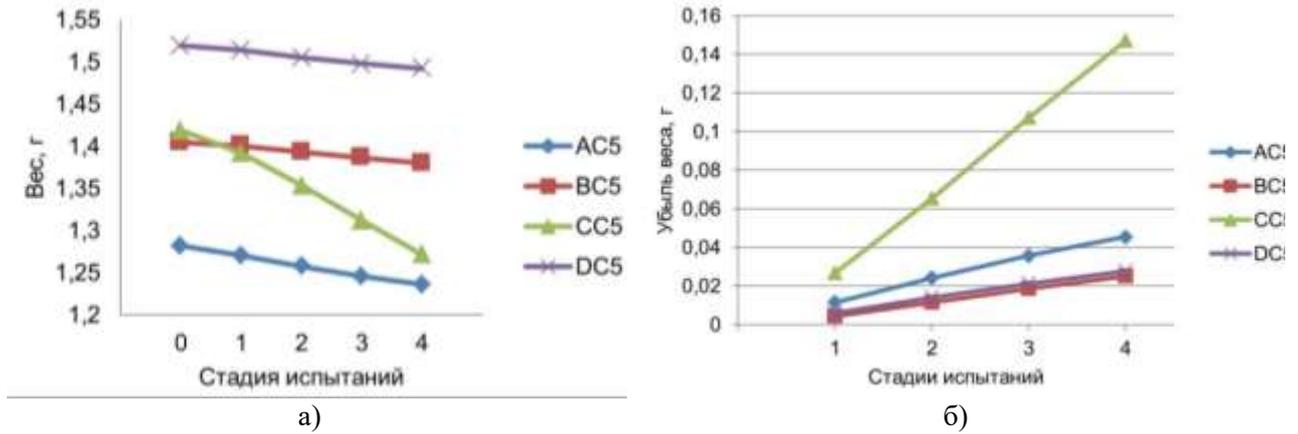
Тәжірибелер кезінде газдың құрамын периодты түрде масс-спектрометр арқылы жазып отырады. Ол үшін масс-спектрометрі бар камераға механикалық ағытқыш PV арқылы бақыланатын ағын бақыланады.

Нәтижелер мен талқылау

Сынақтың төрт кезеңінің соңында графит үлгілерінің (SiC қаптамасы жоқ үлгілер) салмағының өзгеруінің толық бейнесі 1-кестеде және 4-суретте көрсетілген. Сол сияқты SiC қаптамасы бар үлгілердің салмағындағы өзгерістер сынақтың 4 кезеңіндегі тестілеу нәтижелері 2-кестеде және 5-суретте көрсетілген.

1-кесте – Коррозияға сынақтың 4 кезеңіндегі графит үлгілерінің салмағы (қателігі ±0,00001 г)

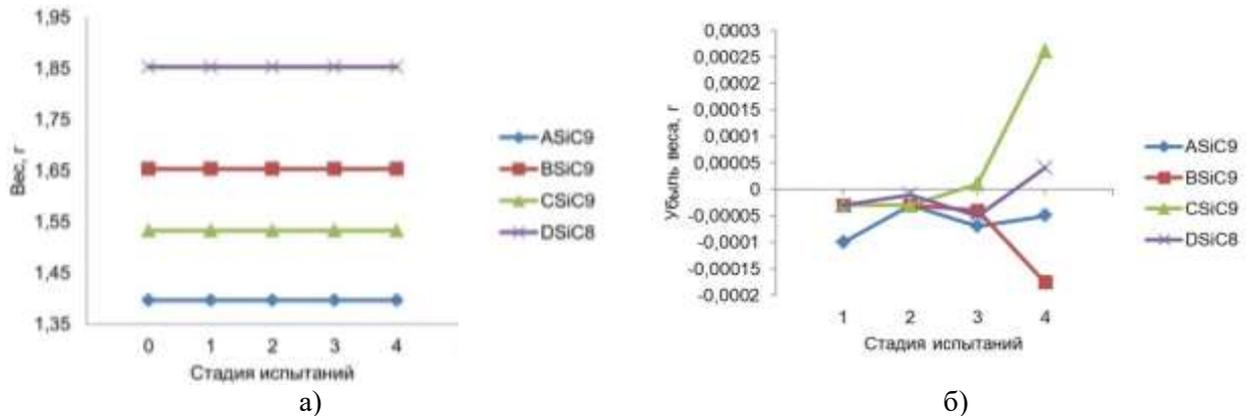
Кезең	АС5, г	ВС5, г	СС5, г	ДС5, г
0 (бастапқы)	1,28156	1,40491	1,41867	1,51962
1	1,27014	1,40053	1,39187	1,51373
2	1,25732	1,39342	1,35343	1,50553
3	1,24591	1,38640	1,31159	1,49793
4	1,23618	1,37975	1,27156	1,49193



4-сурет – Сынақтың төрт кезеңі ішінде графит үлгілерінің салмағы (а) және салмағының жоғалуы (б)

2-кесте – Коррозияға сынақтың 4 кезеңіндегі SiC үлгілерінің салмағы (қателігі ±0,00001 г)

Кезең	ASiC9, г	BSiC9, г	CSiC9, г	DSiC8, г
0 (бастапқы салмақ)	1,39640	1,65283	1,53307	1,85337
1	1,39650	1,65286	1,53310	1,85340
2	1,39643	1,65286	1,53309	1,85338
3	1,39646	1,65286	1,53306	1,85342
4	1,39645	1,65301	1,53281	1,85333



5-сурет – Сынақтың төрт сатысы кезінде SiC қаптамасы бар үлгілердің салмағы (а) және салмағының жоғалуы (б)

1-кестеден және 4-суреттен көрініп тұрғандай, графиттің салмақ жоғалту процесі әр үлгі үшін әртүрлі жылдамдықта дамыған, бірақ әрқашан толық дерлік сызықты, бұл орташа коррозия жылдамдығын есептеуге мүмкіндік береді (120 күннен астам сынақ үшін). Зерттеудің 4 кезеңінен (120 күн) кейін графит үлгілерінің (AC5, BC5, CC5 және DC5) салмағының жоғалуы (коррозиясы) айтарлықтай үлкен (CC5 үлгісі үшін бастапқы салмақтың 10%-нан астамына жетеді). Сонымен қатар, С өндірушісінің графиті

коррозияға көбірек ұшырайды деп біржақты қорытынды жасауға болады. D және B графиттері су буының әсеріне және 1200 К температураға (салмақ жоғалту шамамен 2%) ең төзімді болып шықты. Графит А екінші орында (салмақ жоғалту 3,5%).

3-кестеде 1200 К температура үшін төрт графит үлгісінің орташа коррозия жылдамдығының мәндері көрсетілген, үлгі салмағына, көлеміне және бетінің ауданына нормаланған.

3-кесте – Графит үлгілерінің параметрлері және су буы бар гелийде 1200 К температурада 120 күн ішіндегі олардың коррозия жылдамдығы

Параметр	AC5 үлгісі	BC5 үлгісі	CC5 үлгісі	DC5 үлгісі
Көлемі, м ³	$7,2 \cdot 10^{-7}$	$7,6 \cdot 10^{-7}$	$8,0 \cdot 10^{-7}$	$8,4 \cdot 10^{-7}$
Бетінің ауданы, м ²	$7,52 \cdot 10^{-4}$	$7,92 \cdot 10^{-4}$	$8,32 \cdot 10^{-4}$	$8,72 \cdot 10^{-4}$
Салмақ жоғалту, %	3,54	1,79	10,37	1,82
Салмақ жоғалту, моль	$3,781 \cdot 10^{-3}$	$2,097 \cdot 10^{-3}$	$1,226 \cdot 10^{-2}$	$2,308 \cdot 10^{-3}$
Бір грамм салмақтағы коррозия жылдамдығы, г/(г·сағ)	$1,229 \cdot 10^{-5}$	$6,219 \cdot 10^{-6}$	$3,601 \cdot 10^{-5}$	$6,327 \cdot 10^{-6}$
Бір грамм салмақтағы коррозия жылдамдығы, г/(г·с)	$3,415 \cdot 10^{-9}$	$1,728 \cdot 10^{-9}$	$1,000 \cdot 10^{-8}$	$1,757 \cdot 10^{-9}$
Коррозия жылдамдығы, моль/(м ³ ·с)	$5,066 \cdot 10^{-4}$	$2,661 \cdot 10^{-4}$	$1,478 \cdot 10^{-3}$	$2,650 \cdot 10^{-4}$

5-суреттен көрініп тұрғандай, SiC қаптамасы бар үлгілердің (ASiC9, BSiC9, CSiC9 және DSiC8) салмағының өзгеруінің көріністері әлсіз және көп бағытты. CSiC9 үлгісін қоспағанда (үлгінің негізі C сортты графит болып табылады), мәндердің көпшілігі өлшеу қателігінің шегінде (төрт сынақ кезеңі үшін алынған барлық деректерді статистикалық талдау нәтижелері бойынша салмақ өлшеулерінің ең үлкен абсолютті қателігі $\pm 2,5 \cdot 10^{-5}$ г аспайды, ал сенімділік интервалы $\pm 1,0 \cdot 10^{-5}$ г). Сынақтың үшінші және әсіресе соңғы, төртінші кезеңінен кейін бұл үлгінің салыстырмалы түрде айтарлықтай салмақ жоғалтуының себебі SiC қаптамасының негізгі және/немесе жергілікті жарықтардың пайда болуы мүмкін деп болжанды. Дегенмен, визуалды микроскопиялық талдау және үлгілердің көлденең қыртыстарын коррозиядан кейінгі талдау барысында бұл гипотеза расталмады.

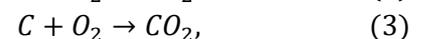
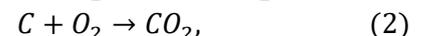
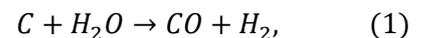
1200 К температурадағы су буы бар гелийдегі SiC қапталған реактор графиттерінің төрт сортының төмен химиялық белсенділігі бойынша алынған нәтиже маңызды болғанымен, қаптамасының эволюциясын болжайтын модельді әзірлеу үшін негіз бола алмайды, мысалы, температура жағдайларында. Әлбетте, бұл үшін мұндай үлгілердің ұқсас сынақтары 1300–1400 К-де жүргізілуі керек. Екінші жағынан, қорғалмаған графиттердің коррозиясы туралы алынған деректер соңғы элементтер әдісімен сандық модельді құру үшін де өте қолайлы.

Оны құру үшін ламинарлы гелий ағыны үшін Навье-Стокс теңдеуімен және теңдеулер жиынтығымен үйлесімдегі жылу өткізгіштік пен жылу сәулеленуін ескере отырып, гелий тасымалдаушы газдағы химиялық белсенді қоспалардың тасымалдануын және олардың графит (көміртек) бетімен химиялық реакцияларының жылдамдығын сипаттайтын

жылу алмасудың негізгі теңдеулерінің аналитикалық жүйесі пайдаланылды (су буы, оттегі, сутегі, CO, CO₂).

6-суреттен көрініп тұрғандай, модельденуші ортаның 3D геометриясы үш негізгі аймақтан тұрады: онда орналасқан зерттелетін төрт графит үлгісі бар жоғары температуралық реакция аймағы (пеш, көлемі шамамен литр); жұмыс қоспасы бар 40 литрлік қабылдағыш цилиндр (гелий + су буы + оттегі іздері) және барлық тәжірибе кезінде пешті қабылдағышпен байланыстыратын ішкі диаметрі 10 мм болатын қосқыш түтік. Еске сала кететін жәйт, үлгілер 1200 К температурада, қабылдағыш бөлме температурасында (300 К), ал жалғастырғыш түтік 400 К температурада.

1200 К реактор графиттерінің коррозиясын сипаттау үшін, біздің ойымызша және бірқатар реактор графиттерін зерттеушілер [6-11] пікірінше, төрт негізгі реакцияны ескеру жеткілікті:

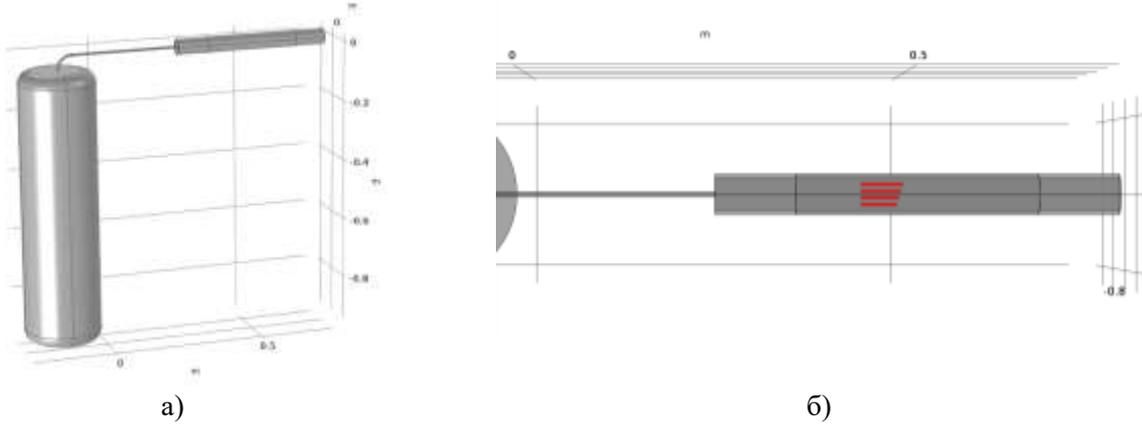


Осылайша, жылу-масса алмасу теңдеулер жүйесіне тасымалдауды (диффузия және конвекция) және (1)-(4) реакцияларының бес химиялық компоненттерінің C_i гелий ағынындағы R_i түзілу/жоғалту реакцияларының жылдамдығын сипаттайтын тағы бесінші теңдеу қосылады. Сонымен бұл теңдеу мына түрге келеді:

$$R_i = \frac{\partial C_i}{\partial t} + \nabla \cdot (-D_i \nabla C_i) + \mathbf{u} \cdot \nabla C_i, \quad (5)$$

$$i = 1 \dots 5,$$

мұндағы C_i – H₂O, O₂, CO, CO₂, H₂, моль/м³ газ компоненттерінің бірінің концентрациясы; D_i – гелийдегі C_i газ компонентінің диффузиялық коэффициенттері, м²/с.



6-сурет – Модель аймағының жалпы көрінісі (а) және сынақ үлгілерінің пештегі қыздыру аймағындағы орналасуы (жоғарғы көрініс) (б)

(1)-(4) реакциялар графит бетінде жүретін гетерогенді каталикалық емес реакциялар болып табылады және біздің жағдайда сорбциялық-десорбциялық механизммен сипатталады, бұл кезде газ молекуласы бос адсорбция орталығына (көміртек атомы) адсорбцияланады деп болжанады, (1)-(4) жиынынан реакция жүреді, оның өнімдері бірден гелийге десорбцияланады. C_{surf} графит бетіндегі адсорбция учаскелерінің концентрациясы тұрақты болып қалады. Сонымен, реакциялардың активтену энергияларына Аррениус тәуелділіктерін ескере отырып, реакциялардың жылдамдығы (1)-(3) келесідей болады:

$$R_i = kr_i \cdot C_{surf} \cdot C_i, \quad (6)$$

$$kr_i = Ar_i \cdot e^{-\frac{E_i}{RT}}, \quad (7)$$

мұндағы kr_i – реакция жылдамдығының коэффициенті, $m^3/(mоль \cdot c)$; C_{surf} – графит бетіндегі адсорбциялық жерлердің концентрациясы, $mоль/m^2$; Ar_i – реакция жылдамдығының

тұрақтысы, $m^3/(mоль \cdot c)$; T – температура, К; E_i – реакцияның активтену энергиясы, $кДж/(mоль \cdot К)$; R – газ тұрақтысы, $8,314 Дж/(mоль \cdot К)$.

Екінші дәрежелі реакция үшін (4)

$$R_4 = kr_4 \cdot C_{surf}^2 \cdot C_{O_2}, \quad (8)$$

мұндағы kr_4 – реакция жылдамдығының коэффициенті, $m^5/(mоль^2 \cdot c)$.

Сипатталған модельмен жұмыс істегенде нөлдік жуықтау ретінде қолданылатын (1)-(4) Ar_i , E_i , реакцияларының параметрлері графит коррозиясына арналған әртүрлі әдебиет көздерінен алынды [12-16]. Модельдеу нәтижелерін эксперименттік мәндерге сәйкестендіру барысында кішірек «үлгі-эксперимент» сәйкессіздігін қамтамасыз ету үшін кейбір параметрлер (негізінен Ar_i) өзгертілді.

Гелийдегі C_i компонентінің D_i диффузиялық коэффициенттері идеал газдар қоспасының жартылай эмпирикалық формуласымен [17, 18] молекулалық соқтығыстардың интегралын Ленард-Джонс әрекеттесу потенциалы арқылы жуықтап анықтады:

$$D_i = 2.6628 \cdot 10^{-22} \frac{\sqrt{T^3(M_i + M_{He})/(2000 \cdot M_i M_{He})}}{\rho \sigma_i \sigma_{He}} \times \left(\frac{1.06036}{\left(\frac{T}{\varepsilon_k}\right)^{0.1561}} + \frac{0.193}{e^{(0.47635 \cdot \frac{T}{\varepsilon_k})}} + \frac{1.03587}{e^{(1.52996 \cdot \frac{T}{\varepsilon_k})}} + \frac{1.76474}{e^{(3.89411 \cdot \frac{T}{\varepsilon_k})}} \right)^{-1}. \quad (9)$$

$$\varepsilon_k = \sqrt{\frac{\varepsilon_i}{k_b} \cdot \frac{\varepsilon_{He}}{k_b}}, \quad (10)$$

мұндағы M_i , M_{He} сәйкесінше C_i және гелий компоненттерінің молярлық массалары; σ –

Ленард-Джонс әрекеттесу потенциалының сипаттамалық ұзындығы, Å ; ε/k_b – оның энергетикалық минимумы, К. Барлық C_i компоненттері үшін σ_i және ε_i/k_b мәндері 4-кестеде келтірілген.

4-кесте – Қоспа компоненттері үшін Ленард-Джонс потенциалды параметрлері [19]

	Газ					
	He	H ₂ O	O ₂	CO	CO ₂	H ₂
$\sigma_i, 10^{-10}, \text{м}$	2,827	2,640	3,467	3,690	3,491	2,827
$\varepsilon_i/k_b, \text{К}$	59,7	809,1	106,7	91,7	195,2	59,7

(1) реакциясының R_1 жылдамдық коэффициентіне келетін болсақ, бұл реакцияның кинетикасы кеуекті реактор графитінде тотығу ингибиторы қызметін атқаратын сутектің парциалды қысымына тәуелді екендігі классикалық жұмыстан [20] белгілі. Біз [7, 8, 16] ұсынылған өрнекті қолдандық, бұл 3-1200 Па және сутегінің 300 Па дейінгі судың парциалды қысымында 1073-1373 К температура диапазонында (1) реакция жылдамдығын болжауға мүмкіндік береді. Осыған сәйкес

$$kr_1(P_{H_2O}, P_{H_2}, T) = \frac{k_1 P_{H_2O}^m}{1 + k_2 P_{H_2}^{0.5} + k_3 P_{H_2O}^m}, \quad (11)$$

мұндағы m – графиттің берілген маркасы үшін сумен реакцияның жартылай эмпирикалық өлшемсіз дәрежесі.

Модельде IG-110 графиті үшін k_1 , ($\text{Па}^{-m} \cdot \text{с}^{-1}$), k_2 , ($\text{Па}^{-0.5}$), k_3 , (Па^{-m}) және m (өлшемсіз) келесі мәндері пайдаланылды [16]:

$$k_1 = 7,6 \cdot 10^{-8} \cdot \exp\left(\frac{71000}{RT}\right), \quad (12)$$

$$k_2 = 1,9 \cdot 10^{-2} \cdot \exp\left(\frac{40000}{RT}\right), \quad (13)$$

$$k_3 = 6,1 \cdot 10^{-18} \cdot \exp\left(\frac{374000}{RT}\right), \quad (14)$$

$$m = 1,5 / (1 + \exp\left(\frac{1327 - T}{34,2}\right)). \quad (15)$$

Гелийдің термофизикалық параметрлері [19]-дан алынған. Модельде гелий идеалды сығылмайтын газ ретінде сипатталған және су буының, сутегінің, көміртегі оксиді мен көмірқышқыл газының қоспалары оның термофизикалық параметрлеріне әсер етпейді. Жылу мәселесінде графит үлгілері тығыздық және жылу өткізгіштіктің типтік параметрлерімен сипатталған. Бұл жағдайда үлгілердің маңызды параметрлері олардың өлшемдері және (1)-(4) реакцияларының параметрлерімен белгіленетін химиялық қасиеттері болып табылады. Әрбір үлгі 3-кестеге сәйкес жеке реакция жылдамдығымен сипатталады, яғни С үлгісінде коррозияның

максималды жылдамдығы (1,0), А үлгісі (0,34), В және D үлгілері (0,18) мәндеріне ие.

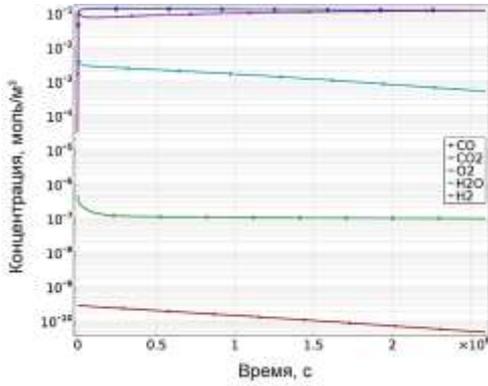
Жұмыс қоспасы – 220-250 кПа қысымдағы су буы мен оттегі қоспасы бар гелий қоспасы толтырылады және реагенттер мен реакция өнімдерін тасымалдай отырып, конвекциялық-диффузиялық жолмен ламинарлы ағынмен үш аймақта (пеш, түтік, қабылдағыш) еркін айналады. Бастапқы сәтте қоспаның құрамында су буының (концентрациясы $12 \cdot 10^{-2}$ моль/м³) және суда еріген оттегінің (концентрациясы $5 \cdot 10^{-4}$ моль/м³) қоспасы бар гелий бар. Су мен оттегінің графит көміртегімен әрекеттесу процесінде жұмыс қоспасы реакция өнімдерімен толтырылады: сутегі, көміртегі оксиді және көмірқышқыл газы. Бастапқы сәтте ағын жоқ (газ қозғалмайды). Ауырлық күші тігінен (қабылдағыш цилиндр бойымен) бағытталған.

Модельді есептеу үшін біз Visual-CFD графикалық интерфейсі бар тегін OpenFOAM® v.2006 пакеті [21] мен rhoReactingFoam (тасымалдау және химиялық реакциялар уақытында), chtMultiRegionFoam (қатты және қозғалатын денеде жылу тасымалдайтын конвекциялық газ ағыны) ерітінділерін қолдандық. Біраз бейімделгеннен кейін үлгіні ANSYS Fluent, Siemens Star CCM+ және т.б. сияқты жетілдірілген платформаларда да енгізуге болады.

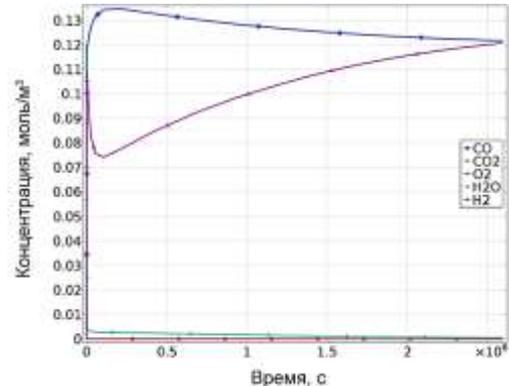
Есептеу уақыт режимінде (өтпелі режим) 720 сағ (тәжірибенің бір кезеңінің ұзақтығының 30 күні) процестің ұзақтығы 1 сағ уақыт қадамымен жүргізілді. Итеративті есептеулер барысында параметрлер (1)-(4) реакциялардың екі шарты орындалатындай өзгертілді: 1) бір кезеңде (720 сағ) үлгіде алынған көміртегі (яғни CO + CO₂) бар түзілген коррозия өнімдерінің мөлшері сынақтар үлгілердің эксперименталды өлшенген салмақ жоғалтуына тең болады; 2) CO концентрациясының (ең алдымен) өзгерулерінің есептелген қисықтары және сынақ фазасындағы H₂ массанализатормен өлшенген эксперимент нүктелерін мүмкіндігінше жақсы сипатады. 7-9-суреттер оңтайлы реакция жылдамдығында (1)-(4) бес химиялық компоненттің концентрациясы мен мөлшерін өзгерту үшін есептелген қисықтарды көрсетеді. Тәжірибелік мәліметтерге сәйкес (3 кестені қараңыз) коррозия тәжірибесінің

бір кезеңінде графиттің жоғалуы 0,05 г (0,0045 моль), бұл 8-суретте көрсетілген бөлінген CO (0,0043 моль) немесе H₂ (0,0047 моль) мөлшеріне (орнату көлемінен интегралды) әбден сәйкес келеді. 9-суреттен көрініп тұрғандай, жалпы алғанда CO және H₂ құрамының есептелген динамикасы қыздыру аймағынан газ үлгілерін

мерзімдік массалық талдау барысында алынған нүктелерге сәйкес келеді. Қыздыру аймағындағы газ құрамын талдау 5 күнде бір рет жүргізілетінін еске сала кетейік. Коррозия тәжірибесін оңтайлы сипаттайтын реакция параметрлерінің қорытынды жинағы (1)-(4) 5-кестеде көрсетілген.

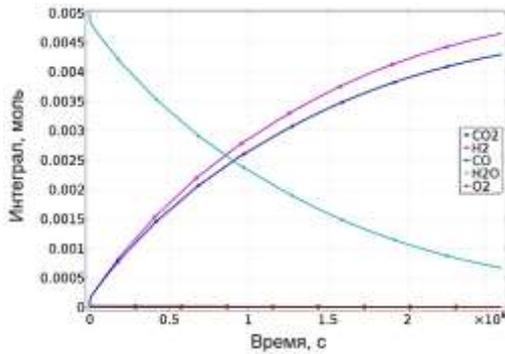


а)

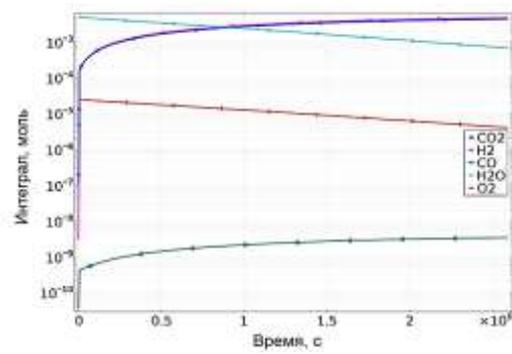


б)

7-сурет – Сызықтық (а) және логарифмдік (б) шкалаларда 30 күн (модель) ішінде T = 1200 K кезінде коррозия тәжірибесі кезінде графит үлгілері аймағындағы газ құрамының өзгеруі

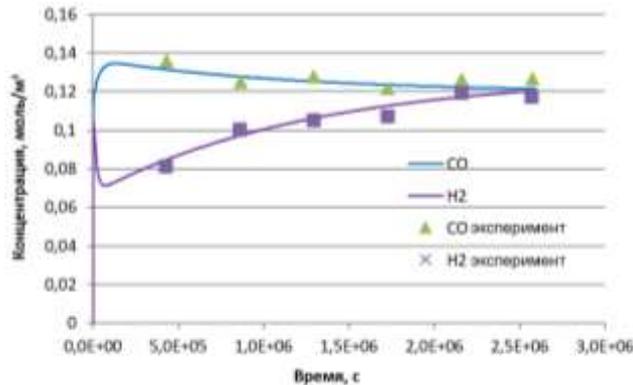


а)



б)

8-сурет – Сызықтық (а) және логарифмдік (б) шкалаларда 30 күн бойы 1200 K коррозияға қарсы тәжірибе кезінде (модель) орнату көлеміндегі газтәрізді орта компоненттерінің санының өзгеруі



9-сурет – 30 күнге созылатын T = 1200 K коррозия тәжірибесі кезінде графит үлгілерінің орналасу аймағында CO және H₂ концентрациясы (үлгі және тәжірибе)

Осылайша, алынған коррозия қондырғысының моделі және реакцияларының параметрлері 1200 К температурадағы графит үлгілерімен тәжірибені толықтай сипаттайды деп болжауға болады. Тәжірибе бір бекітілген температурада жүргізілгендіктен, қазіргі уақытта басқа температуралардағы реакция жылдамдығының өрнектерінің сәйкестігін қосымша тәжірибелерсіз

тексеру мүмкін емес. Дегенмен, реакциялардың белсендіру энергиясы әдеби көздердің мәндерімен сәйкес келетінін ескере отырып, белгілі бір сенімділік дәрежесі бар шағын температура диапазонында (1100-1300 К) осы үлгіні сол модельдер үшін күтілетін салмақ жоғалтуды болжау үшін пайдалануға болады деп болжауға болады.

5-кесте – Графит коррозиясының моделіндегі оңтайлы реакция параметрлері

Реакция	Реакция жылдамдығының коэффициенті, кг	Әдеби-көздер
$C + H_2O \rightarrow CO + H_2$	$\frac{k_1 P_{H_2O}^m}{1 + k_2 P_{H_2}^{0.5} + k_3 P_{H_2O}^m}, M^3/(c \cdot \text{моль}),$ мұндағы $k_1, k_2, k_3, (12)-(15)$ көрселілген	[7,16]
$C + O_2 \rightarrow CO_2$	$10^{-4} \cdot \exp\left(\frac{-45000}{RT}\right), M^3/(c \cdot \text{моль})$	[14,15]
$C + CO_2 \rightarrow 2CO$	$2 \cdot 10^{-4} \cdot \exp\left(\frac{-245000}{RT}\right), M^3/(c \cdot \text{моль})$	[12]
$2C + O_2 \rightarrow 2CO$	$9 \cdot 10^3 \cdot \exp\left(\frac{-209000}{RT}\right), M^5/(c \cdot \text{моль}^2)$	-

Орнатылған көлеміндегі (45 л) реагенттер мен коррозия өнімдерінің мөлшерінің өзгеруі 1100 К температура үшін жоғарыда сипатталған модельді қолдану арқылы есептелді (бұл жағдайда модельдің бастапқы шарттары мен басқа шекаралық шарттары өзгерген жоқ). Тәжірибе температурасының 100 К-ге төмендеуі коррозия жылдамдығының шамамен үш есе төмендеуіне әкелді, бұл әбден қисынды көрінеді және IG-110 графитінің тәжірибелік деректеріне сәйкес келеді [16]. 1300 К температураға ұқсас есептеулер түзілген өнім мөлшерінің күтілетін өсімін бермеді, өйткені қабылдағыштағы су буының берілуі тез «аяқталды» және коррозия процесі «тоқтады». Яғни 1300 К-де салмақ жоғалтудың ұқсас өсуін қаптамасыз ету үшін гелийдегі судың концентрациясын арттыру немесе камерадағы графит мөлшерін азайту қажет болады.

Қорытынды

- ЖТГР реакторының графитін ұзақ мерзімді сынақтың төрт кезеңі жүргізілді, оның барысында үлгілер ЖТГР қалыпты жұмысына сәйкес келетін гелий және қалдық газдар атмосферасында 1200 К температурада 120 күн бойы ұсталынып тұрды;

- сынақтың жалпы ұзақтығының соңғы 120 күнінде таза графит үлгілерінің (SiC қаптамасы жоқ) салмақ жоғалтуы үлгіні өндірушіге байланысты 1,8%-дан 10,4%-ға дейін ауытқиды. Өндіруші C графиті ЖТГР ортасында коррозияға ең сезімтал, ал A, B және D графиттері әлдеқайда

баяу коррозияға ұшырайды (сәйкесінше 3 және 5 есе);

- A-D графиттерінің үстіне SiC қаптамасын пайдалану үлгінің коррозия жылдамдығын салмақ жоғалту/арту қолжетімді таразылармен жеткілікті сенімді түрде тіркелмейтіндей дәрежеде төмендетеді. Дөрекі бағалаулар бойынша коррозия жылдамдығы 100-500 есе төмендейді;

- жобадан жасалған модель төмен қысымды қалдық активті газдар (су буы, оттегі, сутегі және т.б.) болған кезде инертті тасымалдаушы газы бар ыдыстардағы ЖТГР материалдарын бұзудың жоғары температуралық коррозия процестерін сипаттауға мүмкіндік береді;

- модельдеу нәтижелері мен эксперименттік деректер арасындағы жақсы сәйкестік жұмыста қолданылатын модельдеу тәсілдері құрамында графиті бар нақты реакторлық қондырғылардағы, әсіресе ЖТГР реакторларындағы коррозия процестерін сипаттайтын күрделі модельдер үшін негіз бола алатынын көрсетеді.

Алғыс

Бұл зерттеуді Қазақстан Республикасы Білім және Ғылым министрлігінің Ғылым комитеті (Грант №AP09259081) қаржыландырды.

Әдебиеттер

- 1 Ohashi H., Sato H., Tachibana Y., Kunitomi K. and Ogawa M. Concept of an inherently-safe high temperature gas-cooled reactor / The 3rd Intern. Conf. on advances in nuclear science and engineering 2011: Conf. Proc., Denpasar, INDONESIA, November 14-17, 2011-2012. – Vol. 1448.– P.50-58.
- 2 Sawa K., Ueta S. Research and development on HTGR fuel in the HTTR project //Nuclear Engineering and Design. – 2004.– Vol. 233. – P.163-172.
- 3 Minato K., Fukuda K. Thermodynamic analysis of behavior of HTGR fuel and fission products under accidental air or water ingress conditions //Response of fuel, fuel elements and gas-cooled reactor cores under accidental air or water ingress conditions: Proc. of IAEA Technical Committee Meeting. – IAEA-TECDOC-784. – 1995. – P.86-91.
- 4 Nishihara T., Yan X., Tachibana Y., Shibata T., Ohashi H., Kubo S., Inaba Y., Nakagawa S., Goto M., Ueta S., Hirota N., Inagaki Y., Iigaki K., Hamamoto S., Kunitomi K. Excellent Feature of Japanese HTGR Technologies //IAEA Technology 2018–004. – 2018.
- 5 Chikhray Y., et al. Corrosion test of HTGR graphite with SiC-coating //ANS Proc. International Topical Meeting on High Temperature Reactor Technology (HTR 2016). – Las Vegas, NV, November 6-10, 2016. – Vol.1. – P.572-577.
- 6 Yu X., Brissonneau L., Bourdeloie C., Yu S. The modeling of graphite oxidation behavior for HTGR fuel coolant channels under normal operating conditions //Nuclear Engineering and Design. – 2008. – Vol.238. – P.2230-2238.
- 7 Contescu C.I., Mee R.W., Lee Y.(J.J.), Arregui-Mena J.D., Gallego N.C., Burchell T.D., Kane J.J., Windes W.E. Beyond the classical kinetic model for chronic graphite oxidation by moisture in high temperature gas-cooled reactors //Carbon. – 2017. – Vol.127. – P.158-169.
- 8 Kane J.J., Contescu C.I., Smith R.E., Strydom G., Windes W.E. Understanding the reaction of nuclear graphite with molecular oxygen: kinetics, transport, and structural evolution //Journal of Nuclear Materials. – 2017. – Vol. 493. – P.343-367.
- 9 Takeda T., Hishida M. Studies on molecular diffusion and natural convection in a multicomponent gas system //International Journal of Heat Mass Transfer. – 1996. – Vol.39, No. 3. – P.527-536.
- 10 Kadak A.C., Zhai T. Air ingress benchmarking with computational fluid dynamics analysis //Nuclear Engineering and Design. – 2006. – Vol.236. – P.587-602.
- 11 El-Genk M.S., Tournier J.-M.P. Comparison of oxidation model predictions with gasification data of IG-110, IG-430 and NBG-25 nuclear graphite //Journal of Nuclear Materials. – 2012. – Vol.420, No. 1-3. – P.141-158.
- 12 Kim E.S., No H.C. Experimental study on the reaction between nuclear graphite IG-110 and carbon dioxide //Journal of Nuclear Materials. – 2006. – Vol.350. – P.96-100.
- 13 Gremyachkin V.M., Dudkin V.A., Rukhin V.B. Graphite gasification in high-temperature gas flows containing H₂O and CO₂ //Russian Journal of Physical Chemistry B. – 2008. – Vol.1-2, No.4. – P.543-546.
- 14 Uda T., Ogawa M., Seki Y., Kunugi T., Aoki I., Honda T., Okazaki T., Nishino N. Experiments on high temperature graphite and steam reactions under loss of coolant accident conditions //Fusion Engineering and Design. – 1995. – Vol.29. – P.238-246.
- 15 Ferng Y.M., Chi C.W. CFD investigating the air ingress accident for a HTGR simulation of graphite corrosion oxidation //Nuclear Engineering and Design. – 2012. – Vol.248. – P.55-65.
- 16 Contescu C., Lee Y., Mee R. Oxidation kinetics by water vapors of nuclear graphite grade 2114 //Oak Ridge National Laboratory Technical Report, ORNL/TM-2018/1057, 2019.
- 17 Neufeld P.D., Janzen A.R., Aziz R.A. Empirical Equations to Calculate 16 of the Transport Collision Integrals $\Omega^{(L,S)}$ for the Lennard-Jones (12-6) Potential //Journal of Chemical Physics. – 1972. – Vol.57. – P.1100-1102.
- 18 Brokaw R.S. Predicting Transport Properties of Dilute Gases // Industrial and Engineering Chemistry: Process and Design Development. – 1969. – Vol.8, No. 2. – P. 240-253.
- 19 Poling B.E., Prausnitz J.M., O'Connell J.P. The Properties of Gases and Liquids: Fifth Ed. – McGraw-Hill, 2001. – 803 p.
- 20 Walker P.L., Rusinko F., Austin L.G. Gas reactions of carbon //Advances in Catalysis. – 1959. – Vol.11. – P.133-221.
- 21 Open FOAM, free open source CFD software.– URL: <https://www.openfoam.com> (өтініш берілген күні 15.04.2022).

References

- 1 H. Ohashi, et al., Conf. Proc. The 3rd Intern. Conf. on advances in nuclear science and engineering 2011, Denpasar, Indonesia, November 14-17, 1448, 50-58 (2011-2012).
- 2 K. Sawa and S. Ueta, Nuclear Engineering and Design, 233, 163-172 (2004).
- 3 K. Minato and K. Fukuda, Response of fuel, fuel elements and gas-cooled reactor cores under accidental air or water ingress conditions: Proceedings of IAEA Technical Committee Meeting, IAEA-TECDOC-784, 86-91 (1995).
- 4 T. Nishihara, et al., JAEA Technology 2018–004, (2018).

- 5 Y. Chikhray, et al. ANS Proceedings. International Topical Meeting on High Temperature Reactor Technology (HTR 2016), Las Vegas, NV, November 6-10, 1, 572-577 (2016).
- 6 X. Yu, et al., Nuclear Engineering and Design, 238, 2230-2238 (2008).
- 7 C.I. Contescu, et al., Carbon, 127, 158-169 (2017).
- 8 J.J. Kane, et al., J. Nucl. Mater., 493, 343-367 (2017).
- 9 T. Takeda and M. Hishida, Int. J. Heat Mass Transf., 39 (3), 527-536 (1996).
- 10 A.C. Kadak and T. Zhai, Nucl. Eng. Des., 236, 587-602 (2006).
- 11 M.S. El-Genk and J.-M.P. Tournier, J. Nucl. Mater., 420 (1-3), 141-158 (2012).
- 12 E.S. Kim and H.C. No J. Nucl. Mater., 350, 96-100 (2006).
- 13 V.M. Gremyachkin, et al., Russ. J. Phys. Chem. B, 1-2, 543-546 (2008).
- 14 T. Uda, et al., Fusion Eng. Des., 29, 238-246 (1995).
- 15 Y.M. Ferng and C.W. Chi, Nucl. Eng. Des., 248, 55-65 (2012).
- 16 C. Contescu, Y. Lee, R. Mee, Oak Ridge National Laboratory Technical Report, ORNL/TM-2018/1057 (2019).
- 17 P.D. Neufeld, et al., J. Chem. Phys., 57, 1100-1102 (1972).
- 18 R.S. Brokaw Ind. Eng. Chem. Process, 8 (2), 240-253 (1969).
- 19 B.E. Poling, J.M. Prausnitz, J.P. O'Connell, The Properties of Gases and Liquids: Fifth Ed. (McGraw-Hill, 2001), 803 p.
- 20 P.L. Walker, F. Rusinko, L.G. Austin, Adv. Catal., 11, 133-221 (1959).
- 21 OpenFOAM, free open source CFD software.– URL: <https://www.openfoam.com> (request date 15.04.2022).

MPHTI 29.19.21

<https://doi.org/10.26577/RCPH.2022.v81.i2.07>

A. Zhumazhanova^{1,2} , Sh. Giniyatova^{1*} , A. Mutali^{1,2,3} , A. Ibrayeva^{1,2,3} ,
V. Skuratov^{3,4,5} , A. Dauletbekova^{1,2} , E. Korneeva³ , A. Akilbekov¹ , M. Zdorovets^{1,2,6} 

¹L.N. Gumilyov Eurasian National University, Kazakhstan, Nur-Sultan

²Astana Branch of the Institute of Nuclear Physics, Kazakhstan, Nur-Sultan

³G.N. Flerov Laboratory of Nuclear Reactions, Joint Institute for Nuclear Research, Russia, Dubna

⁴National Research Nuclear University «MEPhI», Russia, Moscow

⁵University «Dubna», Russia, Dubna

⁶Ural Federal University, Russia, Yekaterinburg

*email: giniyat_shol@mail.ru

PIEZOSPECTROSCOPIC ANALYSIS OF MECHANICAL STRESSES IN Si₃N₄ AND AlN IRRADIATED WITH HIGH-ENERGY BISMUTH IONS

Depth-resolved Raman piezospectroscopy was used to study residual mechanical stress profiles in polycrystalline silicon and aluminum nitrides irradiated with 710 MeV bismuth ions to fluences of 1×10^{12} , 2×10^{12} , and 1×10^{13} cm⁻². It was found that stress fields of opposite signs are formed in the irradiated Si₃N₄ layer, separated by a buffer zone located at a depth coinciding with the thickness of the sample layer, amorphized at high ion fluences due to multiple overlapping of track regions. At great depths, tensile stresses with magnitude reaches their maximum value in the region of the end of the ion range are detected. In contrast to Si₃N₄, radiation-stimulated changes in mechanical stresses in AlN were within the measurement error throughout the entire thickness of the irradiated layer, except of the near-surface region. The observed effect is associated with the different structural sensitivity of silicon and aluminum nitrides to high-density ionization - the formation of amorphous latent tracks in Si₃N₄ and their absence in AlN.

Key words: silicon nitride, aluminum nitride, swift heavy ions, Raman spectra, mechanical stress, piezospectroscopy.

А.Т. Жұмажанова^{1,2}, Ш.Г. Гиниятова^{1*}, А.К. Мутали^{1,2,3}, А.Д. Ибраева^{1,2,3},

В.А. Скуратов^{3,4,5}, А.К. Дәулетбекова^{1,2}, Е.А. Корнеева³, А.Т. Ақылбеков¹, М.В. Здоровец^{1,2,6}

¹Л. Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Нұр-Сұлтан, Қазақстан

²Ядролық физика институтының Астана филиалы, Нұр-Сұлтан, Қазақстан

³Г. Н. Флерова атындағы Ядролық реакциялар зертханасы, Біріккен ядролық зерттеулер институты, Дубна, Ресей

⁴«МИФИ» Ұлттық зерттеу ядролық университеті, Мәскеу, Ресей

⁵«Дубна» Университеті, Дубна, Ресей

⁶Орал федералдық университеті, Екатеринбург, Ресей

*email: giniyat_shol@mail.ru

Жоғары энергиялы ауыр иондармен сәулеленген Si₃N₄ және AlN механикалық кернеулерді пьезоспектроскопиялық талдау

Кеңістіктік ажыратылымдылығы бар Рамандық пьезоспектроскопия әдістері 1×10^{12} , 2×10^{12} және 1×10^{13} см⁻² флюенске дейін энергиясы 710 МэВ жоғары энергиялы висмут иондарымен сәулеленген бұл жұмыс поликристалды кремний мен алюминий нитридтеріндегі қалдық механикалық кернеулердің профильдерін зерттеу үшін пайдаланылды. Сәулеленген Si₃N₄ қабатында трек аудандарының бірнеше рет қабаттасуы есебінен иондардың жоғары флюенсі кезінде аморфизацияланған үлгі қабатының қалыңдығына сәйкес келетін тереңдікте орналасқан тректік аймақпен бөлінген түрлі белгілердің кернеу өрістері қалыптасатыны зерттеу нәтижесінде анықталды. Үлкен тереңдікте созылу кернеулері тіркелетіні көрсетілді, олардың деңгейі иондар жүгірісінің соңындағы аймақтағы максималды мәнге жететіні анықталды. Si₃N₄ - тен айырмашылығы, AlN - дегі механикалық кернеулердің радиациялық - ынталандырылған өзгеру деңгейі беттік аймақты қоспағанда, сәулеленген қабаттың бүкіл қалыңдығы бойынша өлшеу қатесінің шегінде болды. Байқалатын әсер кремний мен алюминий нитридтерінің жоғары тығыздықтағы ионизация әсеріне әртүрлі құрылымдық сезімталдығымен –

Si₃N₄ - те аморфты латентті тректердің түзілуімен және олардың AlN-де болмауымен байланысты деген қортынды жасалды.

Түйін сөздер: кремний нитриді, алюминий нитриді, жылдам ауыр иондар, комбинациялық шашырау спектрлері, механикалық кернеулер, пьезоспектроскопия.

А.Т. Жумажанова^{1,2}, Ш.Г. Гиниятова^{1*}, А.К. Мутали^{1,2,3}, А.Д.Ибраева^{1,2,3},
В.А. Скуратов^{3,4,5}, А.К. Даулетбекова^{1,2}, Е.А.Корнеева³, А.Т. Акилбеков¹, М.В. Здравовец^{1,2,6}

¹Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Казахстан, г.Нур-Султан

²Астанинский филиал Института ядерной физики, Казахстан, г.Нур-Султан

³Лаборатория ядерных реакций им. Г.Н. Флерова,

Объединённый институт ядерных исследований, Россия, г.Дубна

⁴Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Россия, г.Москва

⁵Университет «Дубна», Россия, г.Дубна

⁶Уральский федеральный университет, Россия, г.Екатеринбург

*email: giniyat_shol@mail.ru

Пьезоспектроскопический анализ механических напряжений в Si₃N₄ и AlN, облученных тяжелыми ионами высоких энергий

Методы рамановской пьезоспектроскопии с пространственным разрешением в данной работе были использованы для изучения профилей остаточных механических напряжений в поликристаллических нитридах кремния и алюминия, облученных высокоэнергетическими ионами висмута с энергией 710 МэВ до флюенсов 1×10^{12} , 2×10^{12} и 1×10^{13} см⁻². По результатам установлено, что в облученном слое Si₃N₄ формируются поля напряжений различного знака, разделенные буферной зоной, находящейся на глубине, совпадающей с толщиной слоя образца, аморфизованного при высоких флюенсах ионов за счет многократного перекрытия трековых областей. На больших глубинах регистрируются растягивающие напряжения, уровень которых достигает максимального значения в области конца пробега ионов. Показано что, в отличие от Si₃N₄, уровень радиационно-стимулированного изменения механических напряжений в AlN был в пределах ошибки измерений по всей толщине облученного слоя, только за исключением приповерхностной области. Наблюдаемый эффект связывается с разной структурной чувствительностью нитридов кремния и алюминия к воздействию ионизации высокой плотности – образованием аморфных латентных треков в Si₃N₄ и их отсутствием в AlN.

Ключевые слова: нитрид кремния, нитрид алюминия, быстрые тяжелые ионы, спектры комбинационного рассеяния, механические напряжения, пьезоспектроскопия.

Introduction

The effect of heavy charged particle irradiation in solids, as a rule, is accompanied by generation of mechanical stresses in the irradiated layer, which, in own turn, affect the defect formation processes. Assessing the stress level and establishing the relationship between the nature of radiation damage and stresses are very important for a correct description of the evolution of a defect structure under various experimental conditions. First of all, such problems were considered for low-energy ion implantation into semiconductor materials. These issues have been studied to the least extent for high-energy ($E > 1 \text{ MeV}/\text{amu}$) ion irradiation, the possibilities of which for solving practical problems are beginning to be in demand only recently. Such research are, in particular, of considerable interest for predicting the long-term radiation stability of ceramic

and oxide materials, showing promise for nuclear applications, against fission fragments impact. The main experimental methods for measuring mechanical stresses are usually the following - curvature measurement method, X-ray, electron and neutron diffraction, electromagnetic and ultrasonic methods [1].

The stress level in a variety of materials can be determined using an approach based on the use of the piezospectroscopic effect. As is known, this effect connects the changes in optical absorption, luminescence, or Raman scattering spectra with the magnitude of mechanical stresses (see, for example, [2-4]). As known, in general, the change in the radiation frequency with stress level can be expressed as [4]:

$$\Delta\nu = \Pi_{ij} \times \sigma_{ij}, \quad (1)$$

where Π_{ij} are the so-called piezospectroscopic coefficients, and σ_{ij} are the stress tensor components. Piezospectroscopic coefficients are determined using of appropriate calibrations, during which a known stress is applied to the material and the corresponding change in frequency relative to the unstressed state is registered [4,5]. In contrast to the methods listed above, which provide information on the stresses in the entire investigated volume of the sample, piezospectroscopy makes it possible to determine the stress level with a spatial resolution up to several hundred nanometers, that is especially important in the case of irradiation of materials with ions of fission fragment energies for which the projected range does not exceed 10 microns. In [6], this approach was used to measure the stress profiles in Si_3N_4 irradiated with high-energy xenon and bismuth ions. As is known, silicon nitride is the only nitride ceramic in which latent tracks of swift heavy ions have been revealed [7-16]. At the same time, no tracks were detected in aluminum nitride even at very high specific ionization energy losses [17]. This paper presents the results of a comparative analysis of residual mechanical stress profiles in AlN and the previously obtained data on Si_3N_4 [6] – nitride ceramics with different structural responses to the high-energy heavy ion impact.

Materials and Methods

The objects of study of this work were polycrystalline silicon and aluminum nitrides samples manufactured by MTI Corporation. The grain sizes ranged from several hundred nanometers to several microns. The samples were irradiated with 710 MeV ^{209}Bi ions at room temperature to fluences of 1×10^{12} , 2×10^{12} , and $1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$. The irradiation experiments were carried out at the U-400 cyclotron of the FLNR JINR (Dubna, Russia). According to calculations, the projected range of bismuth ions in AlN was 29.8 μm .

Irradiated samples were studied by Raman spectroscopy using Solver Spectrum, NT-MDT laser confocal scanning microscope. Raman spectra excited at a wavelength of $\lambda=473 \text{ nm}$ were recorded on the edge of polished sample along the ion trajectory with a spatial resolution of $\sim 1 \mu\text{m}$. The measurement time was optimized for maximum intensity and was 60 seconds.

Results and Discussion

Raman spectra of intact silicon and aluminum nitride specimens excited at a wavelength 473 nm are shown in figure 1.

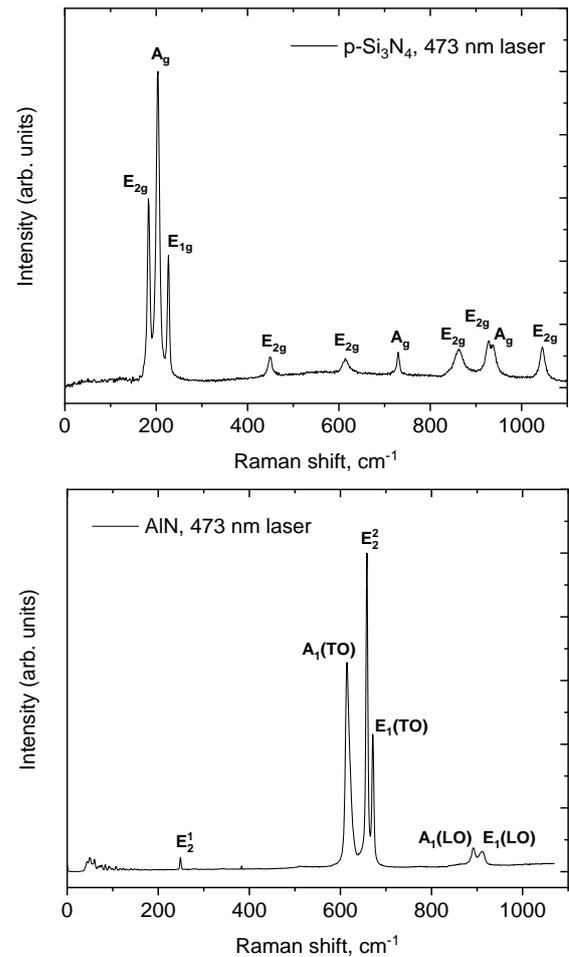


Figure 1 – Raman spectra of initial Si_3N_4 and AlN polycrystals.

Without stopping on the nature of the vibrational modes represented by the corresponding peaks in the Raman spectra studied in detail in [18-23], we note that in piezospectroscopic studies, the most often used is the measurement of the position of the peaks at 862 cm^{-1} (Si_3N_4) [24] and 658 cm^{-1} (AlN) [25].

The piezospectroscopic coefficients for these peaks are 2.22 GPa/cm^{-1} and 2 GPa/cm^{-1} , respectively [24, 4]. The 658 cm^{-1} line in AlN is most significant since because exhibits the greatest stress sensitivity, resulting in the shortest acquisition time for Raman measurements and the highest signal-to-noise ratio. Another advantage of using this band is that the frequency of the E_2 (high) mode, in contrast to the $A_1(\text{LO})$ phonon mode, does not depend on the concentration of free carriers; therefore, only the stress will affect this phonon frequency for measuring the residual stress. All values of the peak frequencies in the Raman spectra in aluminum nitride known from the literature are presented in table 1.

Table 1. Experimental data on Raman spectra in AlN

Position	248.69	612.87	658.26	671.12	892.52	910.81	cm ⁻¹
Phonon mode	E_2^1	$A_1(TO)$	E_2^2	$E_1(TO)$	$A_1(LO)$	$E_1(LO)$	

Figure 2 shows the changes in the position of the 658 cm⁻¹ (AlN) line, which were measured at a depth of 5 μm. First of all, it should be noted that mechanical polishing of AlN introduces defects, which leads to both broadening and a shift of the main peak relative to the initial position from 658.26 cm⁻¹ to 657.78 cm⁻¹. To take this circumstance into account, the frequency value measured at a distance of ~ 100 microns from the surface was taken as the initial position of the peak, which significantly exceeds the depth of the irradiated layer. As can be

seen from the part of the spectrum shown in the inset, irradiation with bismuth ions leads to the signal intensity decrease and the peak broadening, which is associated with the general disordering of the crystal lattice. In addition, a shift of the peak towards lower frequencies is also observed. A negative value of $\Delta\nu$ indicates that compressive mechanical stresses are detected at a given depth of the irradiated layer of the aluminum nitride sample.

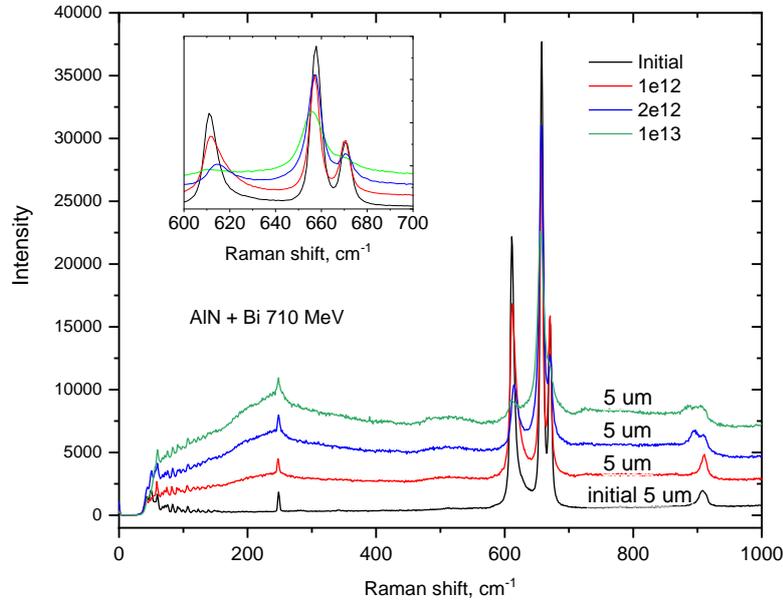


Figure 2 – Raman spectra measured at a depth of 5 μm from the surface of AlN irradiated with bismuth ions to various fluences. The inset shows the spectral region near the 658 cm⁻¹ line.

The generation of compressive stresses in ceramics irradiated with high-energy ions was previously revealed not only in Si₃N₄ [6], but also in oxides Al₂O₃ and ZrO₂:Y [26-28]. In all these materials are formed latent tracks as disordered regions around ion trajectories, both amorphized (completely or partially) and retaining the crystalline structure. In all cases, an important feature of the tracks is their reduced density in comparison with the density of the surrounding matrix. Their accumulation with an increase in the ion fluence leads

to a decrease in the density and, as a consequence, to an increase in the volume of the sample layer in which the tracks are formed, which is the source of compressive stresses due to the difference between the volumes of the irradiated and unirradiated parts of the material. The appearance of stresses in AlN, in which the tracks are not detected by transmission electron microscopy, indicates that defects formed in elastic collisions also lead to mechanical stresses but much lower magnitude in comparison to silicon nitride.

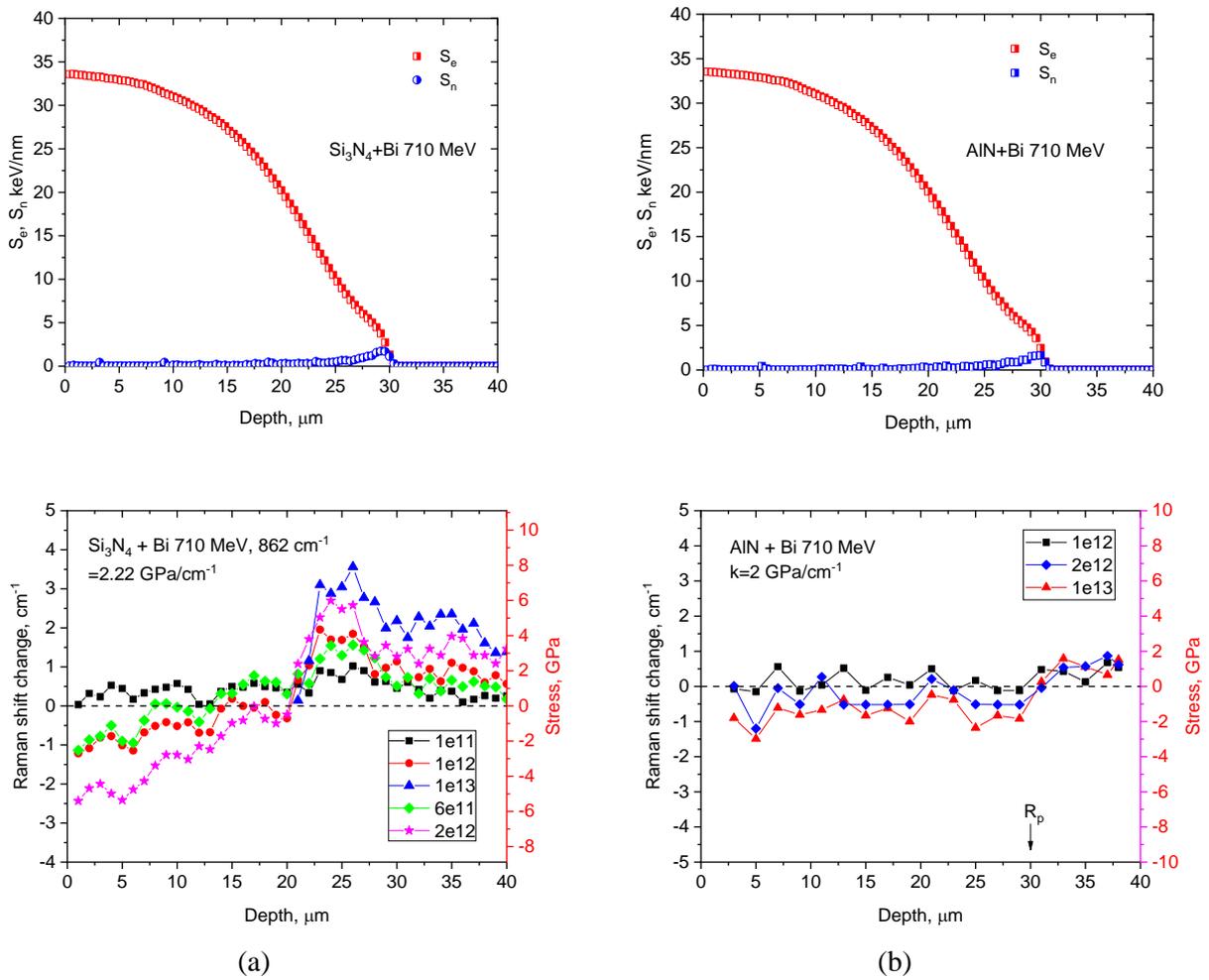


Figure 3 – Variation of the spectral position of the 862 cm⁻¹ (Si₃N₄) - a) and b) - 658 cm⁻¹ (AlN) lines via the Bi ion fluence and the depth of the irradiated layer

Figures 3a and 3b show the change in spectral position of lines used for evaluation of stress level in the silicon (a) and aluminum (b) nitrides irradiated with bismuth ions with respect to the values for the non-irradiated material. The corresponding piezospectroscopic coefficients for frequencies 862 cm⁻¹ (Si₃N₄) and 658 cm⁻¹ (AlN) according to [24,4] are 2,22 and 2,0 GPa. As can be seen, stresses in AlN are detected only at the highest fluence of bismuth ions - 1×10¹³ cm⁻², which clearly indicates the differences in the formation of structural defects in these ceramics. The data shown in fig. 3b, do not also allow drawing a conclusion about the correlation of the stress profile in AlN obtained for a fluence of 1×10¹³ cm⁻² with the profiles of ionization and nuclear energy losses. Although tracks in aluminum nitride are not observed, it cannot be ruled out that a high level of specific ionization energy losses can affect the evolution of the defect structure, which requires further detailed studies.

Conclusions

Polycrystalline Si₃N₄ and AlN irradiated with high-energy (710 MeV) bismuth ions to fluences of 1×10¹², 2×10¹², and 1×10¹³ cm⁻² were studied by Raman piezospectroscopy with spatial resolution about one micron. In the irradiated silicon nitride layer, stress fields of different signs are formed, separated by a buffer zone located at a depth coinciding with the thickness of the sample layer, amorphized at high ion fluences due to multiple overlapping of track regions. Deeper, tensile stresses are registered and reach its maximum in ion end of range. Compared to Si₃N₄, mechanical stresses in AlN are found to be out of experimental inaccuracy only at a bismuth ion fluence of 1×10¹³ cm⁻².

Funding

This research was funded by the Science Committee of the Ministry of Education and Science of the Republic of Kazakhstan (Grant No. 08856368).

References

- 1 Withers P.J., Bhadeshia H. K. Residual stress. Part 1 – Measurement techniques //Mat. Sci. Technol. – 2001. – Vol.17. – P.355-465.
- 2 Ma Q., Clarke D. R. Stress Measurement in Single – Crystal and Polycrystalline Ceramics Using Their Optical Fluorescence.// Journal of the American Ceramic Society. – 1993– Vol.76 – P.1433-1442.
- 3 Ciacchi L.C., Gregori G., Lugh V., Rossi A. and Sergio V. Piezo – spectroscopy: A materials science perspective.// Recent Res. Devel. A – Plied Spectroscopy. – 1999. – Vol.2. – P.243-272.
- 4 Murari N., Sergio V., Pezzotti G., Katagiri G., Meriani S., Nishida T. Raman Piezo-Spectroscopic Behavior of Aluminum Nitride //Appl. Spectrosc. – 1997. – Vol.51, No11 – P.1761-1765.
- 5 Pezzotti G. Measurements of microscopic stresses in Si – based polycrystalline ceramics. //Key Eng. Mater. – 2005. – Vol. 287 – P. 438-448.
- 6 Zhumazhanova A., Mutali A., Ibrayeva A., Skuratov V., Dauletbekova A., Korneeva E., Akilbekov A., Zdorovets M. Raman Study of Polycrystalline Si₃N₄ Irradiated with Swift Heavy Ions. //Crystals. – 2021– Vol.11 – P.1313.
- 7 Zinkle S.J., Skuratov V.A., Hoelzer D.T. On the conflicting roles of ionizing radiation in ceramics.// Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. Mater. At. – 2002– Vol. 191 – P.758-766.
- 8 Janse van Vuuren A., Ibrayeva A., Skuratov V., Zdorovets M. Analysis of the microstructural evolution of silicon nitride irradiated with swift Xe ions // Ceram. Int. – 2020. – Vol. 46 – P.7155-7160.
- 9 Janse van Vuuren A., Skuratov V., Ibrayeva A., Zdorovets M. Microstructural Effects of Al Doping on Si₃N₄ Irradiated with Swift Heavy Ions //Acta Phys. Pol. A. – 2019. – Vol.136. – P.241-244.
- 10 Kitayama T., Morita Y., Nakajima K., Narumi K., Saitoh Y., Matsuda M., Sataka M., Tsujimoto M., Isoda S., Toulemonde M., Kimura K. Formation of ion tracks in amorphous silicon nitride films with MeV C60 ions. //Nucl Instrum Methods Phys Res B. – 2015. – Vol.356. – P.22-27.
- 11 Janse Van Vuuren A., Ibrayeva A., Rymzhanov R.A., Zhalmagambetova A, O’Connell J.H., Skuratov V.A., Uglov V.V., Zlotski S.V., Volkov A.E., Zdorovets M. Latent tracks of swift Bi ions in Si₃N₄. //Materials Research Express 7. – 2020. – Vol.7, No.2. – Art.No 025512.
- 12 Janse van Vuuren A., Ibrayeva A.D., O’Connell J.H., Skuratov V.A., Mutali A., Zdorovets M.V. Latent ion tracks in amorphous and radiation amorphized silicon nitride //Nucl Instrum Methods Phys Res B. – 2020. – Vol.47. – P.16-23.
- 13 Canut B., Ayari A., Kaja K., Deman A.L., Lemiti M., Fave A., Souifi A., Ramos S. Ion – induced tracks in amorphous Si₃N₄ films //Nucl Instrum Methods Phys Res B. – 2008. – Vol.266, No. 12-13. – P.2819-2823.
- 14 Morita Y., Nakajima K., Suzuki M., Narumi K., Saitoh Y., Ishikawa N., Hojou K., Tsujimoto M., Isoda S., Kimura K. Surface effect on ion track formation in amorphous Si₃N₄ films //Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. – 2013– Vol.315. – P.142-145.
- 15 Ibrayeva A., Janse van Vuuren A., Skuratov V.A., Zdorovets M.V., O’Connell J.H. A – Plicability of the i – TS model to evaluation of latent track parameters in silicon nitride //20th Intern. Conf. «Radiation Effects in Insulators». Nur-Sultan, Kazakhstan. – 2019. – P.157.
- 16 Janse van Vuuren A., Ibrayeva A., Skuratov V.A., Zdorovets M.V. iTS Model – Based Analysis of Track Formation in Crystalline and Amorphous Silicon Nitride //Proc. of the 13th Intern. Conf. of the Interaction of Radiation with Solids. Minsk Belarus. – 2019. – P.97-99.
- 17 Skuratov V.A., Uglov V.V., Sokhatsky A.S., Zlotski S.V., Janse van Vuuren A., Neethlinh J., O’Connell J. Radiation stability of nanocrystalline ZrN coating irradiated with energy Xe and Bi ions //9th Intern. Conf. Interaction of Radiation with Solids. Minsk Belarus. – 2011 – P.91-93.
- 18 Sergio V. et al. Stress Dependence of the Raman Spectrum of β Silicon Nitride //Journal of the American Ceramic Society. – 1996. – Vol.79, No3. – P.781-784.
- 19 Vogelgesang R., Grimsditch M., Wallace J.S. Polarized ultraviolet Raman spectroscopy of β – Si₃N₄ //J. Appl. Phys. – 2002. – Vol. 92, No6. – P.3103-3106.
- 20 Dong J., Sankey O. F. Assignment of the Raman active vibration modes of β – Si₃N₄ using micro – Raman scattering //Int. J. Appl. Phys. – 2000. – Vol.87, No 2. – P.958-959.
- 21 Wada N., Solin S.A., Wong J., Prochazk S. Raman and IR absorption spectroscopic studies on α β and amorphous Si₃N₄ //J Non Cryst Solids. – 1981. – Vol. 43. – P.7-15.
- 22 Cai Y., Zeng Q., Zhang L., Cheng L., Xu Y. First – principles study of vibrational and dielectric properties of β – Si₃N₄ //Journal of Physical Review B. – 2006. – Vol.74. – P.174301.
- 23 Honda K., Yokoyama S., Tanaka S. Assignment of the Raman active vibration modes of β – Si₃N₄ using micro – Raman scattering //J. Appl. Phys. – 1999. – Vol. 85 – P. 7380.
- 24 Muraki N., Katagiri G., Sergio V., Pezzotti G., Nishida T. Ma – Ping of residual stresses around an indentation in β – Si₃N₄ using Raman spectroscopy //J. Mater. Sci. – 1997. – Vol.32. – P.5419-5423.
- 25 Lughia V., Clarke D.R. Defect and stress characterization of AlN films by Raman spectroscopy //Appl. Phys. Lett. – 2006. – Vol. 89. – ArtNo241911.
- 26 Skuratov V.A., Kirilkin N.S., Kovalev Yu.S., Strukova T.S., Havanscak K. Depth – resolved photo – and ionoluminescence of LiF and Al₂O₃ //Nucl Instrum Methods Phys Res B. – 2012. – Vol.286. – P.61-66.
- 27 .Sattonnay G., Moll S., Herbst – Ghysel M., Legros C., Costantini J.M., Thomé L. Mechanical stresses induced in ceramic oxides by ion irradiation // Nucl Instrum Methods Phys Res B. – 2008. – Vol.266. – P.3052-3056.

28 Sattonnay G., Lahrichi M., Herbst – Ghysel M., Garrido F. Thomé L. Stress field induced by swift heavy ion irradiation in cubic yttria stabilized zirconia //J. Appl. Phys. – 2007. – Vol.101. – Art.No 103516.

References

- 1 P.J. Withers, H.K. Bhadeshia, *Mat. Sci. Technol.*, 17, 355-465 (2001).
- 2 Q. Ma, D.R. Clarke, *J. Am. Ceram. Soc.*, 76, 1433-1442 (1993).
- 3 L.C. Ciacchi, G. Gregori, et.al, *Recent Res. Devel. Applied Spectroscopy* 2, 243-272 (1999).
- 4 N. Murari, V. Sergo, et.al, *Appl. Spectrosc.* 51, 1761–1765 (1997).
- 5 G. Pezzotti, *Key Eng. Mater.* 287, 438-448 (2005).
- 6 A. Zhumazhanova, A. Mutali, et.al, *Raman, Crystals*, 11, 1313 (2021).
- 7 S.J. Zinkle, V.A. Skuratov, D.T. Hoelzer, *B Beam Interact. Mater. At.* 191, 758–766 (2002).
- 8 A. Janse van Vuuren, A. Ibrayeva, et.al, *Ceram. Int.* 46, 7155–7160 (2020).
- 9 A. Janse van Vuuren, A. Ibrayeva, et.al, *Acta Phys. Pol. A*, 136, 241–244 (2019).
- 10 T. Kitayama, Y. Morita, et.al, *Nucl Instrum Methods Phys Res B*, 356, 22-27 (2015).
- 11 A. Janse Van Vuuren, A. Ibrayeva, et.al, *M. Latent tracks of swift Bi ions in Si₃N₄. Materials Research Express* 7, 7, 2, 025512 (2020).
- 12 A. Janse Van Vuuren, A. Ibrayeva, et.al., *Nucl Instrum Methods Phys Res B*, 473, 16–23 (2020).
- 13 B. Canut, A. Ayari, et.al, *Nucl Instrum Methods Phys Res B*, 266, 12-13, 2819-2823 (2008).
- 14 Y. Morita, K. Nakajima, et.al, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 315, 142-145 (2013).
- 15 A. Ibrayeva, Janse van Vuuren, et.al, 20th International Conference «Radiation Effects in Insulators». Nur-Sultan (Astana), Kazakhstan. 157 (2019).
- 16 A. Janse van Vuuren, A. Ibrayeva, et.al, *Proceedings of the 13th International Conference of the Interaction of Radiation with Solids*. Minsk, Belarus, 97-99 (2019).
- 17 V.A. Skuratov, J. Uglov, et.al, 9th International Conference. *Interaction of Radiation with Solids*. Minsk, Belarus, 91-93 (2011).
- 18 V. Sergo, et.al, *Journal of the American Ceramic Society*, 79, 3, 781-784 (1996).
- 19 R. Vogelgesang, M. Grimsditch, J.S. Wallace, *J. Appl. Phys.*, 92, 6, 3103-3106 (2002).
- 20 J. Dong, O.F. Sankey, *Journal of Applied Physics*, 87, 2, 958-959 (2000).
- 21 N. Wada, S.A. Solin, J. Wong, S. Prochazk, *Journal of Non-Crystalline Solids*, 43, 7-15 (1981)
- 22 Y. Cai, Zeng, et.al, *Journal of Physical Review B*, 74, 174301 (2006)
- 23 K. Honda, S. Yokoyama, S. Tanaka, *J. Appl. Phys.*, 85, 7380 (1999).
- 24 N. Muraki, G. Katagiri, et.al, *Journal of Material Science*, 32, 5419-5423 (1997)
- 25 V. Lughia, D.R. Clarke, *Appl. Phys. Lett.* 89, 241911 (2006).
- 26 V.A. Skuratov, N.S. Kirilkin, et.al, *Nucl Instrum Methods Phys Res B*, 286, 61-66 (2012).
- 27 G. Sattonnay S. Moll, et.al, *Nucl. Instr. Meth. B*, 266, 3052-3056 (2008).
- 28 G. Sattonnay, M.; Lahrichi et.al, *J. Appl. Phys.*, 101, 103516 (2007).

Е.Ю. Кедрук¹ , М.Б. Айтжанов² , Л.В. Гриценко^{1*} , Х.А. Абдуллин² 

¹Satbayev University, Казахстан, г. Алматы

²Национальная нанотехнологическая лаборатория открытого типа КазНУ им. аль-Фараби, Казахстан, г. Алматы

*email: gritsenko_lv@mail.ru

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ОКСИДА ЦИНКА ДЛЯ РАЗЛОЖЕНИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Стремительное увеличение численности населения и быстрое развитие промышленности привело к образованию промышленных стоков и загрязнению водоёмов вредными для их обитателей и здоровья людей отходами производства. В связи с этим актуальной является задача очистки водных ресурсов от промышленных выбросов, таких как пестициды, органические красители, тяжёлые металлы и другие отходы. Среди оксидов переходных металлов оксид цинка (ZnO) является наиболее перспективным широкозонным полупроводниковым материалом, который благодаря своим уникальным свойствам, активно используется в различных методах очистки сточных вод. В данной работе изучена фотокаталитическая активность наноструктурированных образцов оксида цинка, синтезированных экологичным, низкочастотным простым методом термического разложения дигидрата ацетата цинка в отношении инсектицида широкого спектра Би-58 Нового, основным активным компонентом которого является фосфорорганическое соединение диметоат. Методом оптической спектроскопии и фотолюминесценции проведено исследование водного раствора Би-58 Нового, подвергнутого ультрафиолетовому излучению в присутствии образцов оксида цинка. Аналитическое разделение проводили методом высокоэффективной жидкостной хроматографии. Анализ полученных результатов показал эффективность применения наноструктурированных образцов оксида цинка для фотокаталитического разложения инсектицида Би-58 Нового.

Ключевые слова: оксид цинка, термическое разложение, фотокаталитическая активность, инсектицид Би-58 Новый.

Е.Ю. Кедрук¹, М.Б. Айтжанов², Л.В. Гриценко^{1*}, Х.А. Абдуллин²

¹Satbayev University, Қазақстан, Алматы қ.

²Ашық түрдегі ұлттық нанотехнологиялық зертханасы Әл-Фараби ат. Қазақ ұлттық университеті, Қазақстан, Алматы қ.

*email: gritsenko_lv@mail.ru

Органикалық қосылыстарды ыдырату үшін мырыш оксидін қолдану

Халық санының тез өсуі және өнеркәсіптің қарқынды дамуы өнеркәсіптік ағынды сулардың пайда болуына және су объектілерінің ластануына, олардың тұрғындары мен халқына зиянды әсер етті. Осыған байланысты су ресурстарын өнеркәсіптік шығарындылардан, мысалы, пестицидтерден, органикалық бояғыштардан, ауыр металдардан және басқа да өндіріс қалдықтарынан тазарту міндеті өзекті болып табылады. Өтпелі металл оксидтерінің ішінде мырыш оксиді (ZnO) ең перспективалы кең жартылай өткізгіш материал болып табылады, ол өзінің бірегей қасиеттеріне байланысты ағынды суларды тазартудың әртүрлі әдістерінде белсенді қолданылады. Бұл жұмыста біз мырыш ацетаты дигидратының термиялық ыдырауының экологиялық таза, арзан қарапайым әдісімен синтезделген наноқұрылымды мырыш оксиді үлгілерінің фотокаталитикалық белсенділігін кең спектрлі инсектицид Би-58 Новыға қатысты зерттедік. ол диметоатат болып табылатын фосфорорганикалық қосылыс. Оптикалық спектроскопия және фотолюминесценция мырыш оксиді үлгілерінің қатысуымен ультракүлгін сәулеленуге ұшыраған Би-58 жаңа су ерітіндісін зерттеу үшін пайдаланылды. Аналитикалық бөлу жоғары өнімді сұйықтық хроматографиясы арқылы жүзеге асырылды. Алынған нәтижелерді талдау Би-58 жаңа инсектицидінің фотокаталитикалық ыдырауы үшін мырыш оксидінің наноқұрылымды үлгілерін қолданудың тиімділігін көрсетті.

Түйін сөздер: мырыш оксиді, термиялық ыдырау, фотокаталитикалық белсенділік, инсектицид жаңа Би-58.

Y.Y. Kedruk¹, M.B. Aitzhanov², L.V. Gritsenko^{1*}, Kh.A. Abdullin²

¹Satbayev University, Kazakhstan, Almaty

²National Nanotechnology Laboratory of Open Type of Al-Farabi Kazakh National University, Kazakhstan, Almaty

*email: gritsenko_lv@mail.ru

Application of zinc oxide for decomposition of organic compounds

The rapid increase in population and the rapid development of industry has led to the formation of industrial effluents and pollution of water bodies with production waste harmful to their inhabitants and human health. In this regard, the task of cleaning water resources from industrial emissions, such as pesticides, organic dyes, heavy metals and other wastes, is relevant. Among transition metal oxides, zinc oxide (ZnO) is the most promising wide-gap semiconductor material, which, due to its unique properties, is actively used in various wastewater treatment methods. In this work, we studied the photocatalytic activity of nanostructured zinc oxide samples synthesized by an environmentally friendly, low-cost simple method of thermal decomposition of zinc acetate dihydrate with respect to the wide-spectrum insecticide Bi-58 New, the main active component of which is the organophosphorus compound dimethoate. Optical spectroscopy and photoluminescence were used to study an aqueous solution of Bi-58 New subjected to ultraviolet radiation in the presence of zinc oxide samples. Analytical separation was carried out by high performance liquid chromatography. An analysis of the obtained results showed the effectiveness of the application of nanostructured zinc oxide samples for the photocatalytic decomposition of insecticide Bi-58 New.

Key words: zinc oxide, thermal decomposition, photocatalytic activity, insecticide Bi-58 New.

Введение

В последние годы значительно возросло использование органических красителей в различных отраслях промышленности, таких как кожевенная, бумажная, пластиковая, текстильная, пищевая, полиграфическая, косметическая, фармацевтическая и др. [1, 2]. Красители, содержащиеся в сточных водах, могут отрицательно влиять на водную среду из-за уменьшения проникновения солнечного света, угрожать здоровью человека [3].

Не менее опасными химическими загрязнителями являются пестициды, используемые в сельскохозяйственной отрасли для уничтожения различных видов вредителей, наносящих ущерб культурам. В последнее время в аграрной промышленности всё чаще используют фосфорорганические пестициды в качестве альтернативы хлорорганическим соединениям, так как фосфорорганические пестициды считаются менее опасными из-за их быстрой деградации в окружающей среде. Однако, если органофосфаты соответствуют подходящим условиям окружающей среды, они могут сохраняться во многих компонентах окружающей среды в течение длительного периода времени [4].

Ярким примером фосфоорганических пестицидов является диметоат, который может вызывать неврологические расстройства, снижать репродуктивность, повреждать ДНК и вызывать другие гистопатологические изменения [5]. Хотя

диметоат является весьма токсичным и классифицируется как умеренно опасный, он крайне опасен для обитателей водоёмов и серьёзно влияет на их физиологию и поведение [6]. Кроме того, недавние исследования показывают, что остатки диметоата и его производных могут быть обнаружены в фруктах, овощах и даже в коровьем молоке [5].

Масштабное использование пестицидов для увеличения прибыли от сельскохозяйственного производства привело к загрязнению сточных вод вредными выбросами и нанесению серьёзного ущерба окружающей среде. В силу своей природы эти соединения потенциально токсичны для многих живых организмов, включая человека [2]. В связи с этим остро стоит вопрос очистки сточных вод от пестицидов и других загрязнений.

Традиционные технологии, широко используемые для удаления органических красителей и пестицидов, в основном включают физические, химические, биологические и комплексные процессы очистки, такие как электродиализ, мембранная фильтрация, осаждение, адсорбция, электрохимическое восстановление и электроионизация [7]. На сегодняшний день фотокаталитическое окисление - один из самых эффективных химических методов, демонстрирующий большой потенциал в очистке сточных вод за счёт индукции образования гидроксильных радикалов и супероксид-аниона путём облучения широкозонных полупроводниковых фотокатализаторов, таких как TiO₂, ZnO, CdS, WO₃, SrTiO₃,

Fe₂O₃ и т.д. [8]. Когда полупроводники, которые находятся в контакте с раствором электролита, освещаются с энергией, превышающей их ширину запрещённой зоны E_g, возникают возбуждённые высокоэнергетические состояния электронных и дырочных пар (e⁻/h⁺). Эти частицы могут либо рекомбинировать в объёме полупроводника и рассеивать входящую энергию в виде тепла, либо мигрировать к поверхности частиц полупроводника и реагировать с адсорбированными донорами электронов или акцепторами электронов. Фотогенерированные дырки действуют как мощные окислители, а электроны как мощные восстановители и инициируют широкий спектр химических окислительно-восстановительных реакций, которые могут привести к полной минерализации органических соединений [4].

Многofункциональные наночастицы ZnO демонстрируют полупроводниковые свойства с широкой запрещённой зоной 3,37 эВ, а также представляют собой пьезоэлектрический материал с большим выходом при энергии связи 60 мэВ [9, 10]. К тому же оксид цинка считается безопасным материалом для людей и животных их-за своей стойкости и селективности.

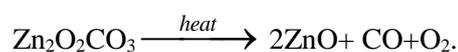
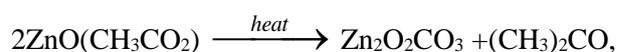
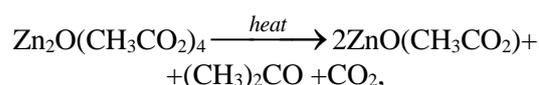
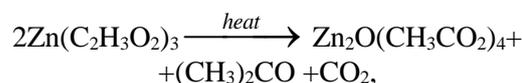
В литературе представлено множество методов синтеза оксида цинка, таких как термическое разложение, пиролиз, магнетронное распыление, сольвотермическая реакция, принудительный гидролиз, золь-гель метод, CVD, гидротермальный метод и другие [11-14]. Наноструктурированный ZnO имеет широкий спектр применения в различных областях, таких как оптические устройства, самоочищающиеся краски, адресная доставка лекарств, косметика, медицинские устройства, текстильная промышленность и фотокатализ [15-18].

Описание эксперимента и обсуждение полученных результатов

Исследуемые образцы оксида цинка были получены простым низкзатратным методом термического разложения в атмосфере дигидрата ацетата цинка (CH₃COO)₂Zn×2H₂O при температурах 400°C и 700°C в течение 2, 4 и 10 часов согласно способу, описанному в работе [19]. При синтезе наночастиц ZnO (NPs) дигидрат ацетата цинка помещался в керамический тигель, закрытый керамической крышкой. Масса полученного образца ZnO NPs составляла приблизительно 1/3 от массы исходного ацетата

цинка, что весьма близко к расчётному выходу продукта (37,1%).

Согласно работе [20] преимущественно потеря веса исходного материала происходит благодаря сгоранию в прекурсором углекислого газа (CO₂) и ацетона ((CH₃)₂CO). Процесс образования оксида цинка при этом можно описать превращением следующих реакций [20]:



Фотокаталитическая активность синтезируемых образцов была изучена при деградации водного раствора красителя RhB и водного раствора инсектицида Би-58 Нового на поверхности ZnO NPs под воздействием УФ-освещения путём измерения спектров оптической плотности. Источником УФ освещения являлась ртутная лампа (LHGGermany, мощность 14 Вт). Спектры оптической плотности исследуемых образцов были изучены на двухлучевом спектрофотометре UV/Vis Lambda 35 (PerkinElmer).

На рисунке 1 показаны спектры деградации водного раствора RhB-красителя, содержащего 9 мг образца ZnO NPs, при ультрафиолетовом излучении. Забор проб раствора RhB для измерения спектров оптической плотности осуществлялся через каждые 30 минут в течение 2.5 часов. Из рисунка видно, что максимум интенсивности поглощения исходного раствора RhB с порошком ZnO приходится на 554 нм.

С увеличением времени экспонирования интенсивность поглощения RhB постепенно снижается в присутствии ZnO NPs, что свидетельствует об уменьшении концентрации красителя RhB. Относительная концентрация красителя RhB уменьшается с увеличением времени экспозиции, при этом для всех представленных образцов краситель RhB значительно деградирует на поверхности ZnO NPs под действием УФ освещения в первые 30 мин экспозиции.

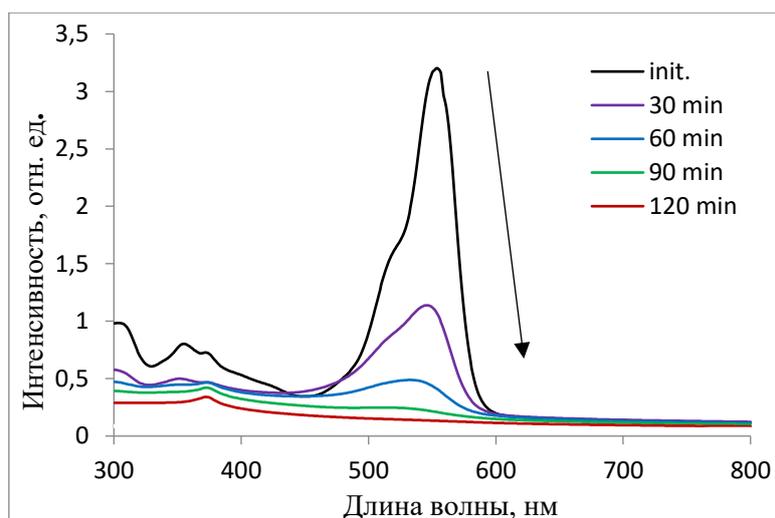


Рисунок 1 – Изменение спектров оптической плотности водного раствора RhB с образцом ZnO, полученного при отжиге ацетата цинка в атмосфере, продолжительность отжига 10 часов при температуре 400°C, при УФ-освещении в течение 120 мин

В работе [19] было показано, что данные образцы демонстрируют высокую фотокаталитическую активность в отношении органического красителя Родамина В. Было отмечено, что параметры отжига оказывают влияние на морфологию и степень кристалличности синтезированных образцов. Наибольшую фотокаталитическую активность демонстрировали образцы, синтезированные в течение 10 часов при температуре 400°C [19].

Разложение водного раствора фосфорорганического инсектицида Би-58 Нового было исследовано в присутствии образцов ZnO, которые продемонстрировали высокую фотокаталитическую активность в отношении органического красителя Родамина В. Основным действующим веществом данного пестицида является диметоат $C_5H_{12}NO_3PS_2$ ($CH_3NHCOCH_2SPS(OCH_3)_2$). Диметоат (Dimethoate, 2-dimethoxyphosphinothioylsulfanyl-N-methylacetamide) относится к классу фосфорорганических соединений (сложный эфир фосфорной кислоты). Благодаря системному действию диметоат проникает внутрь растений и уничтожает скрытоживущих вредителей. Он обладает системной активностью, кишечным и контактным действием, является ингибитором холинэстеразы, действуя на нервную систему и вызывая угнетение дыхания и сердечной деятельности, представляет угрозу для здоровья человека.

С целью исследования количественного состава диметоата и инсектицида Би-58 Нового в водных растворах, подвергнутых ультрафиолетовому облучению в присутствии

частиц оксида цинка, был проведён их количественный анализ. Разделение и определение диметоата проводилось на высокоэффективном жидкостном хроматографе (ВЭЖХ) Agilent 1200 series (Agilent, Германия), оснащённом четырёхканальным градиентным насосом, дегазатором, автосамплером, термостатом колонок и диодно-матричным детектором. Разделение проводили на колонке Agilent Zorbax SB-C18 4,6x150 мм, диаметр частиц - 3,5 мкм. Время анализа составляло 10 мин. В качестве элюента использовали смесь ацетонитрила:вода (600:300). Раствор хроматографировали при 60 об. % ацетонитрила в изократическом режиме со скоростью потока 1 мл/мин. Температуру колонки поддерживали постоянной на уровне 30°C. Объём вводимой пробы составлял 20 мкл. Детектирование проводили на длине волны 270 ± 8 нм. Для определения содержания диметоата в исследуемых водных растворах был построен градуировочный график (рисунок 2).

Количественное определение диметоата проводили методом абсолютной калибровки. Рабочие стандартные растворы с концентрациями 5,0 25,0 и 50,0 мкг/л готовили из основного стандартного раствора диметоата, соответствующим последовательным разбавлениям подвижной фазой для ВЭЖХ. Концентрация исходного стандартного образца составляла 100 мкг/л. Коэффициент корреляции градуировочного графика в данном диапазоне составил $R=0.9654$ (рисунок 2).

Спектры оптического поглощения водного раствора инсектицида БИ-58 Нового с образцом

ZnO, полученным при термическом разложении дигидрата ацетата цинка в атмосфере при температуре 400°C, подвергнутого УФ-освещению в течение 120 мин представлены на рисунке 3. Отмечено, что с увеличением времени

УФ освещения раствора интенсивность поглощения возрастает, а край спектра поглощения немного смещается в область более низких энергий $h\nu$.

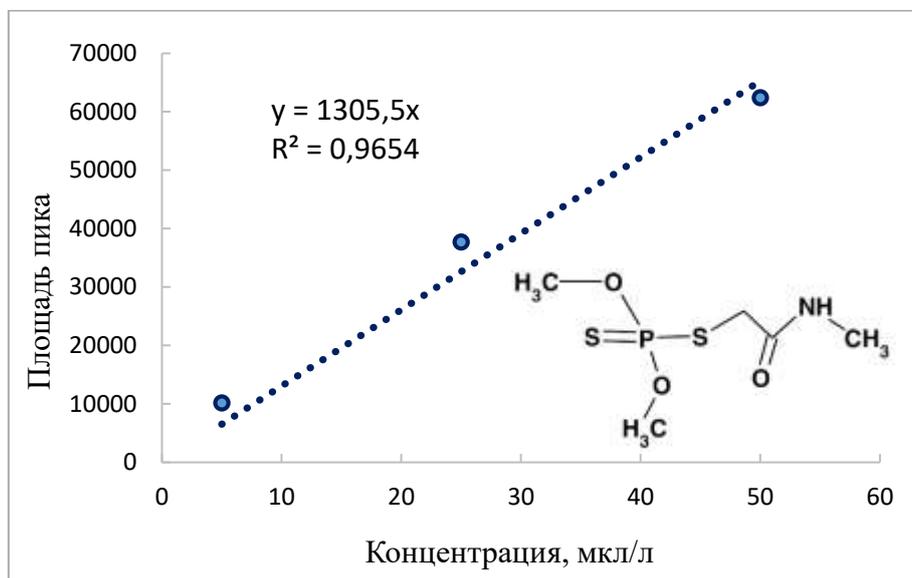


Рисунок 2 – Градуировочный график диметоата и его структурная формула

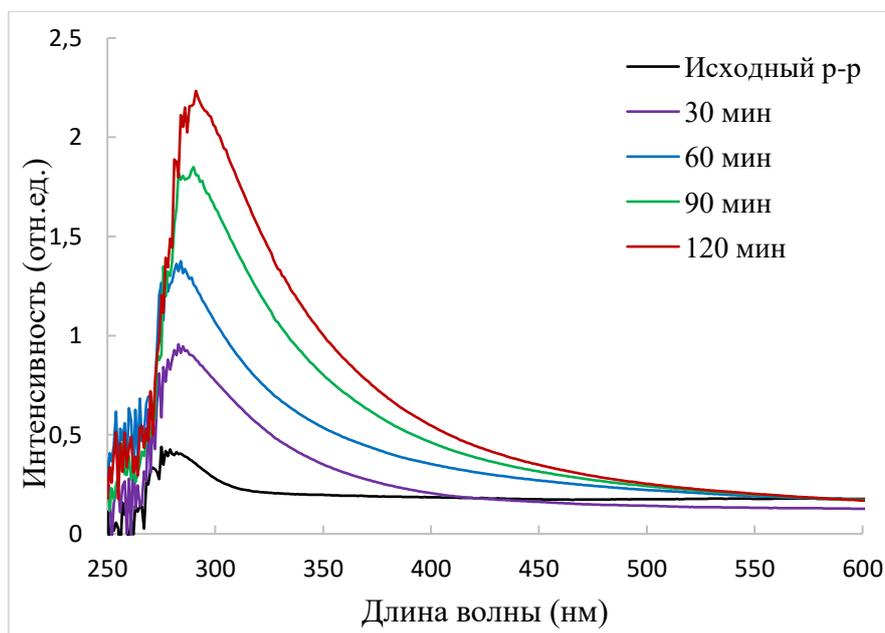


Рисунок 3 – Спектры оптической плотности водного раствора инсектицида БИ-58 Нового с полученным образцом ZnO при УФ-освещении в течение 120 мин

На рисунке 4 представлены хроматограммы водных растворов диметоата, инсектицида БИ-58 Нового без ZnO, а также инсектицида БИ-58 Нового, содержащего синтезированные образцы ZnO. Для водного раствора инсектицида БИ-58 Нового в

присутствии синтезированных образцов ZnO представлены хроматограмма исходного раствора и хроматограмма данного раствора, подвергнутого УФ излучению в течение 120 минут. Забор проб производился через каждые 30 минут облучения.

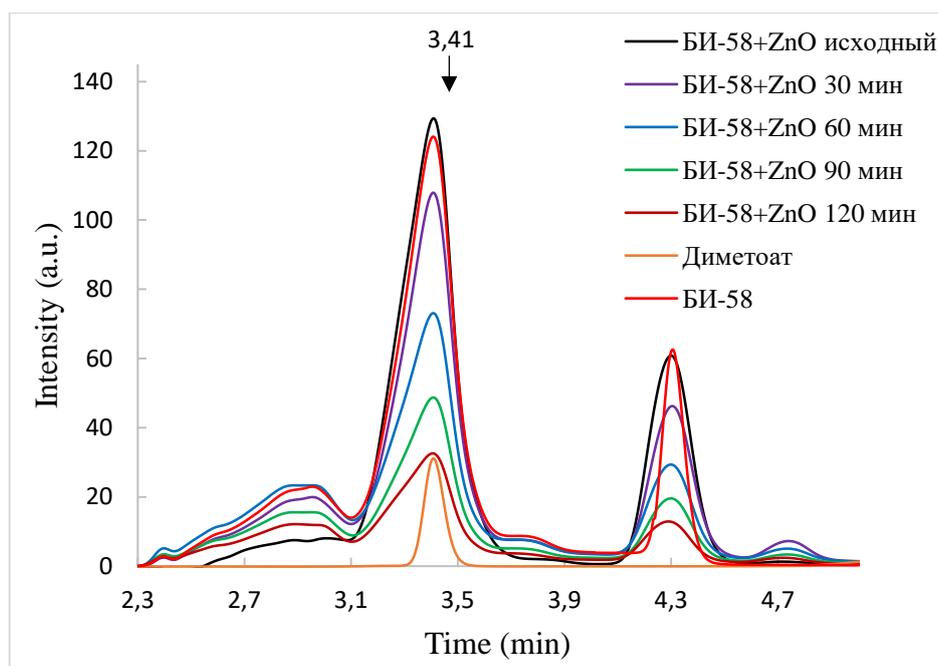


Рисунок 4 – Хроматограммы водных растворов диметоата, пестицида БИ-58 Нового без ZnO и инсектицида БИ-58 Нового, содержащего синтезированные образцы ZnO, при УФ освещении

При количественном определении диметоата методом ВЭЖХ было установлено, что концентрация диметоата в исходном образце БИ-58 составляет 0,61 мкг/л, а концентрация образца с водным раствором БИ-58 и ZnO при УФ освещении в течение 120 минут составляет 0,16

мкг/л. Таким образом, было установлено, что концентрация водного раствора БИ-58 с ZnO при УФ обработке в течение 120 минут уменьшается приблизительно в 4 раза, что свидетельствует о разложении пестицида.

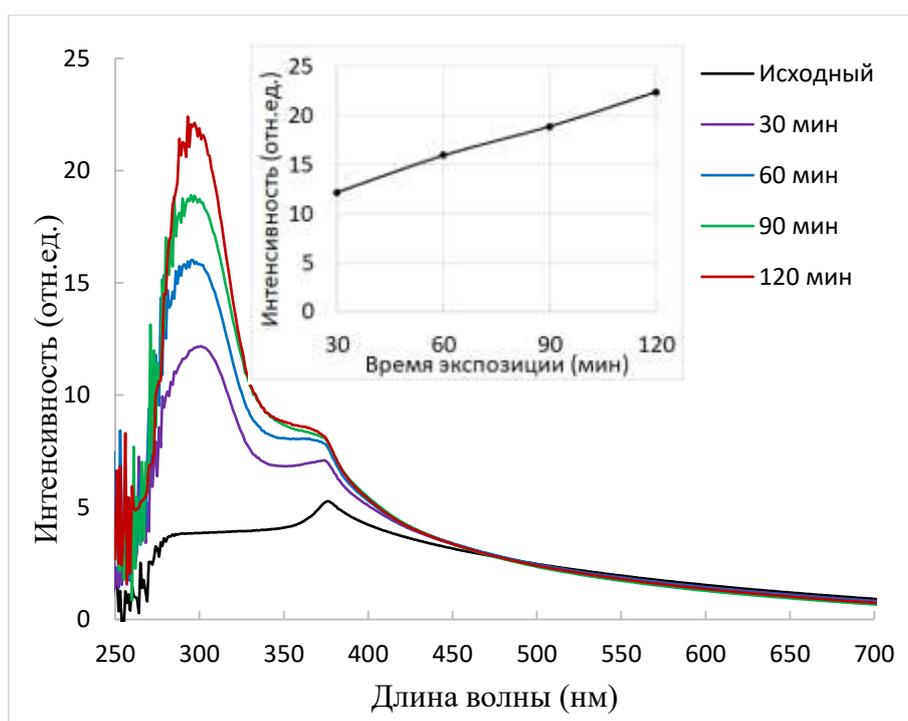


Рисунок 5 – Спектры фотолуминесценции водного раствора БИ-58 Нового в присутствии ZnO исходного и при УФ облучении в течение 120 минут

Результаты исследования фотолюминесцентных свойств водного раствора пестицида БИ-58 Нового и синтезированного образца ZnO под действием УФ излучения приведены на рисунке 5. Отмечено, что исследуемый раствор БИ-58 Нового обладает фотолюминесценцией (ФЛ) в ультрафиолетовом диапазоне с максимумом, приходящимся на длину волны 300 нм. При увеличении времени экспозиции интенсивность ФЛ постепенно, практически линейно возрастает (вставка на рис. 5). Увеличение интенсивности ФЛ при уменьшении концентрации пестицида в растворе объясняется фёрстеровским резонансным переносом энергии, при котором происходит перенос энергии возбуждения между молекулами-хромофорами в ближнем поле за счёт диполь-дипольного взаимодействия, или транспортом электронов при контакте молекул пестицида-акцепторов с поверхностью частиц ZnO (соответственно уменьшением вклада электронов ZnO в ФЛ) [21]. Таким образом увеличение интенсивности ФЛ при увеличении времени экспозиции также свидетельствует о деградации пестицида в растворе.

Заключение

Образцы оксида цинка, полученные простым методом термического разложения дигидрата ацетата цинка при температуре 400°C в течение 10 часов, продемонстрировали фотокаталитическую активность в отношении фосфорорганического инсектицида БИ-58 Нового. Показано, что концентрация пестицида в водном растворе в присутствии синтезированных образцов ZnO под действием УФ излучения в течение двух часов уменьшается в 4 раза. Таким образом, использованный простой в исполнении метод синтеза наночастиц ZnO экономичен, не требует сложного дорогостоящего оборудования, пригоден для крупномасштабного производства высокоактивных ZnO фотокатализаторов для разложения вредных органических загрязнителей водоёмов под УФ-излучением благодаря своей невысокой стоимости и высокой фотокаталитической активности.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке Комитета науки Министерства образования и науки Республики Казахстан (грант No. AP08856173).

Литература

- 1 Nyankson E., Efavi J.K., Agyei-Tuffour B. and Manu G. Synthesis of TiO₂-Ag₃PO₄ photocatalyst material with high adsorption capacity and photocatalytic activity: application in the removal of dyes and pesticides // RSC Adv. – 2021. – Vol.11. – P.17032-17045.
- 2 Russo M., Iervolino G., Vaiano V. W-Doped ZnO Photocatalyst for the Degradation of Glyphosate in Aqueous Solution //Catalysts. – 2021. – Vol.11. – P.234.
- 3 Nahi J., Radhakrishnan A., Raghavan R., Bhaskaran B. Efficient photocatalytic degradation of organic dye from aqueous solutions over zinc oxide incorporated nanocellulose under visible light irradiation // Main Group Metal Chemistry. – 2020. – Vol. 43 (1). – P.84-91.
- 4 Nur Alam Md., Alamgir Zaman Chowdhury M., Sabir Hossain M., Mohammad Mijanur Rahman, Abdur Rahman M., Siew Hua Gan, Ibrahim Khalil Md. Detection of Residual Levels and Associated Health Risk of Seven Pesticides in Fresh Eggplant and Tomato Samples from Narayanganj District //Journal of Chemistry. – 2015. – Vol. 2015. – 7 p.
- 5 Liu X., Li Y., Zhou X., Luo K., Hu L., Liu K., Bai L. Photocatalytic degradation of dimethoate in Bok choy using cerium-doped nano titanium dioxide //PLOS ONE. – 2018. – Vol. 13(5). – P.1-9.
- 6 Singh R.N., Pandey R.K., Singh N.N., Das V.K., Acute toxicity and behavioral responses of common carp Cyprinus carpio (Linn.) to an organophosphate (dimethoate) //World Journal of Zoology. – 2009. – Vol. 4 (2). – P.70-75.
- 7 Lin X., Yang A., Huang G., Zhou X., Zhai Y., Chen X. and McBean E. Treatment of Aquaculture Wastewater through Chitin/ZnO Composite Photocatalyst //Water. – 2019. – Vol. 11 (2). – P.310.
- 8 Cao Y-Q., Zi T-Q., Zhao X-R., Liu C., Ren Q., Fang J-B., Li W.-M., Li A.-D. Enhanced visible light photocatalytic activity of Fe₂O₃ modified TiO₂ prepared by atomic layer deposition // Scientific Reports. – 2020. – Vol. 10. – P.13437.
- 9 Carofiglio M., Barui S., Cauda V., Laurenti M. Doped Zinc Oxide Nanoparticles: Synthesis, Characterization and Potential Use in Nanomedicine // Applied Sciences. – 2020. – Vol. 10 (15). – P. 5194.
- 10 Raj N.B., PavithraGowda N.T., Pooja O.S., Purushotham B., Kumar M.R.A., Sukrutha S.K., Ravikumar C.R., Nagaswarupa H.P., AnandaMurty H.C., Boppana S.B. Harnessing ZnO nanoparticles for antimicrobial and photocatalytic activities //Journal of Photochemistry and Photobiology. – 2021. – Vol. 6. – P.100021.
- 11 Ningsih S., Khair M., & Veronita S. Synthesis and Characterization of ZnO Nanoparticles Using Sol-Gel Method //Indonesian Journal of Chemical Science. – 2021. – Vol. 10 (1). – p. 59-67.

- 12 Haque Md. J., Bellah Md. M., Hassan Md. R., Rahman S. Synthesis of ZnO nanoparticles by two different methods & comparison of their structural, antibacterial, photocatalytic and optical properties // *Nano Express*. – 2020. – Vol. 1. – P.010007.
- 13 Rajendran N.K., George B.P., Houreld N.N., Abrahamse H. Synthesis of Zinc Oxide Nanoparticles Using *Rubus fairholmianus* Root Extract and Their Activity against Pathogenic Bacteria // *Molecules*. – 2021. – Vol. 26. – P. 3029.
- 14 Shahzad S., Javed S. and Usman M. A Review on Synthesis and Optoelectronic Applications of Nanostructured ZnO // *Front. Mater.* – 2021. – Vol. 8. – P. 613825.
- 15 Prasad A. R., Williams L., Garvasis J., Shamsheera K. O., Basheer S. M., Kuruvilla M., & Joseph A. Applications of phyto-genic ZnO nanoparticles: A review on recent advancements // *Journal of Molecular Liquids*. – 2021. – Vol. 331 (6). – P. 115805.
- 16 Spoial A., Ilie C.-I., Trus R.-D., Oprea, O.-C., Surdu V.-A., Vasile B.S., Ficai A., Ficai D., Andronescu E., Dit L.-M. Zinc Oxide Nanoparticles for Water Purification // *Materials*. – 2021. – Vol. 14. – P. 4747.
- 17 Al-Ariki S., Yahya N. A. A., Al-A'nsi S. A., Jumali M. H. H., Jannah A. N., & Abd-Shukor R., Synthesis and comparative study on the structural and optical properties of ZnO doped with Ni and Ag nanopowders fabricated by sol gel technique // *Scientific Reports*. – 2021. – Vol. 11. – P. 11948.
- 18 Tănase M. A., Marinescu M., Oancea P., Răducan A., Mihaescu C. I., Alexandrescu E., Nistor C.L., Jinga L.-I., Ditu L.M., Petcu C., Cinteza L. O. Antibacterial and Photocatalytic Properties of ZnO Nanoparticles Obtained from Chemical versus *Saponaria officinalis* Extract-Mediated Synthesis // *Molecules*. – 2021. – Vol. 26 (7). – P.2072.
- 19 Уалиханов Р.Е., Гриценко Л.В., Кедрук Е.Ю., Абдуллин Х.А. Фотокаталитические свойства наноструктурированного оксида цинка // *Вестник КазНУ*. – 2019. – Т.133 (3). – С.542-548.
- 20 Labuayai S., Promarak V., Maensiri S. Synthesis and optical properties of nanocrystalline ZnO powders prepared by a direct thermal decomposition route // *Appl Phys A*. – 2009. – Vol. 94. – P.755–761.
- 21 Bakar N. A., Salleh M. M., Umar A. A. and Yahaya M. The detection of pesticides in water using ZnCdSe quantum dot films // *Adv. Nat. Sci.: Nanosci. Nanotechnol.* – 2011. – Vol. 2 (2). – P. 025011.

References

- 1 E. Nyankson, J.K. Efavi, B. Agyei-Tuffour and G. Manu, *RSC Adv*, 11, 17032 (2021).
- 2 M. Russo, G. Iervolino and V. W. Vaiano, *Catalysts*, 11, P. 234 (2021).
- 3 J. Nahi, A. Radhakrishnan, R. Raghavan and B. Bhaskaran, *Main Group Metal Chemistry*, 43 (1), 84-91 (2020).
- 4 Md. Nur Alam, M. Alamgir Zaman Chowdhury, M. Sabir Hossain, Mohammad Mijanur Rahman, M. Abdur Rahman, Siew Hua Gan and Md Ibrahim Khalil, *Journal of Chemistry*, 2015, 7 p. (2015).
- 5 X. Liu, Y. Li, X. Zhou, K. Luo, L. Hu, K. Liu and L. Bai, *Plos One*, 13(5), 1-9 (2018).
- 6 R.N. Singh, R.K. Pandey, N.N. Singh and V.K. Das, *World Journal of Zoology*, 4 (2), 70-75 (2009).
- 7 X. Lin, A. Yang, G. Huang, X. Zhou, Y. Zhai, X. Chen and E. McBean, *Water*, 11, 310 (2019).
- 8 Y-Q. Cao, T-Q. Zi, X-R. Zhao, C. Liu, Q. Ren, J.-B. Fang, W.-M. Li and A.-D. Li, *Scientific Reports*, 10, 13437 (2020).
- 9 M. Carofiglio, S. Barui, V. Cauda and M. Laurenti, *Applied Sciences*, 10(15), 5194 (2020).
- 10 N.B Raj, N. T. Pavithra Gowda, O. S. Pooja, B. Purushotham, M. R. A. Kumar, S. K. Sukrutha and S. B. Boppana, *Journal of Photochemistry and Photobiology*, 6, 100021 (2021).
- 11 S. Ningsih, M. Khair and S. Veronita, *Indonesian Journal of Chemical Science*, 10(1), 59-67 (2021).
- 12 Md. J. Haque, Md. M. Bellah, Md. R. Hassan and S. Rahman, *Nano Express*, 1, 010007 (2020).
- 13 N.K. Rajendran, B.P. George, N.N. Houreld and H. Abrahamse, *Molecules*, 26, 3029 (2021).
- 14 S. Shahzad, S. Javed and M. Usman, *Front. Mater*, 8, 613825 (2021).
- 15 R. Prasad, L. Williams, J. Garvasis, K. O. Shamsheera, S. M. Basheer, M. Kuruvilla and A. Joseph, *Journal of Molecular Liquids*, 331, 115805 (2021).
- 16 Spoial, C.-I. Ilie, R.-D. Trus, O.-C. Oprea, V.-A. Surdu, B.S. Vasile, A. Ficai, D. Ficai, E. Andronescu and L.-M. Dit, *Materials*, 14, 4747 (2021).
- 17 S. Al-Ariki, N. A. A. Yahya, S. A. Al-A'nsi, M. H. H. Jumali, A. N. Jannah and R. Abd-Shukor, *Scientific Reports*, 11 (1), 11948 (2021).
- 18 M. A. Tănase, M. Marinescu, P. Oancea, A. Răducan, C. I. Mihaescu, E. Alexandrescu and L. O. Cinteza, *Molecules*, 26 (7), 2072 (2021).
- 19 R.E. Ualihanov, L.V. Gritsenko, Y. Y. Kedruk and Kh.A. Abdullin, *Vestnik KazNITU*, 133 (3), 542-548 (2019). (In Russ.)
- 20 S. Labuayai, V. Promarak and S. Maensiri, *Appl Phys A*, 94, 755-761 (2009).
- 21 N.A. Bakar, M. M. Salleh, A. A. Umar and M. Yahaya, *Adv. Nat. Sci.: Nanosci. Nanotechnol.*, 2 (2), 025011 (2011).

МРНТИ 29.19.19.

<https://doi.org/10.26577/RCPH.2022.v81.i2.09>

Ол.Д. Золотаренко^{1,2} , О.П. Рудакова² , Ан.Д. Золотаренко^{1,2} , Д.В. Щур^{2*} ,
Н.А. Гаврилюк^{1,2} , Н.Т. Картель¹ , О.Д. Золотаренко² , В.А. Машира^{1,2} 

¹Институт химии поверхности им. А.А. Чуйко НАН Украины, Украина, г. Киев

²Институт проблем материаловедения им. И.Н. Францевича НАН Украины, Украина, г. Киев

*email: dmitry.schur@gmail.com

АТОМЫ ВНЕДРЕНИЯ В ОКТА- И ТЕТРАЭДРИЧЕСКИХ МЕЖДОУЗЛИЯХ ОЦК КРИСТАЛЛОВ СО СВОБОДНОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ

Физические свойства кристаллов определяются их химической природой, структурой как всего объема, так и поверхностного слоя. Поверхность металла, ионного или ковалентного кристалла и полупроводника можно рассматривать как особое состояние вещества со своей химией и физикой. Интерес к проблеме поверхности твердого тела, к науке о поверхности, к физике тонких пленок стимулируется достижениями в физике твердого тела, техническими новшествами, возможностями создания новых пленочных материалов с уникальными свойствами, задачами современной техники, требованиями технологии по созданию устройств для вычислительной техники и микроэлектроники.

В настоящей работе рассмотрены процессы перераспределения атомов внедрения по поверхностным и объемным междоузлиям, проведены исследования равновесного распределения внедренных атомов на поверхности и в объеме кристалла, а также влияния внешнего давления на поверхностное и объемное распределение атомов внедрения. Знание процессов перераспределения атомов внедрения по междоузлиям кристалла и вызывающих их причин может позволить целенаправленно формировать эти процессы с целью получения тех или иных физических характеристик материалов. Кинетика перераспределения атомов внедрения по междоузлиям в объеме изучалась для металлов и упорядочивающихся сплавов различных структур.

Ключевые слова: кристалл, твердое тело, строение твердых тел

Ol.D. Zolotarenko^{1,2}, O.P. Rudakova², An.D. Zolotarenko^{1,2}, D.V. Shchur^{2*},
N.A. Gavrilyuk^{1,2}, N.T. Kartel¹, O.D. Zolotarenko², V.A. Mashira^{1,2}

¹Chuiko Institute of Surface Chemistry, National Academy of Sciences of Ukraine, Ukraine, Kiev

²Frantsevich Institute for Problems of Materials Science of N.A.S. of Ukraine, Ukraine, Kiev

*email: dmitry.schur@gmail.com

Integration atoms in octa- and tetrahedral internodes of BCC crystals with a free surface

The physical properties of crystals are determined by their chemical nature, the structure of both the entire volume and the surface layer. The surface of a metal, ionic or covalent crystal and semiconductor can be considered as a special state of matter with its own chemistry and physics. The interest in the problem of solid state surfaces, in the science of surface, in the physics of thin films is stimulated by advances in solid state physics, technical innovations, opportunities to create new film materials with unique properties, the challenges of modern technology, the requirements of technology to create devices for computing technology and microelectronics.

In this work the processes of redistribution of infiltration atoms along the surface and bulk inter-nodes are considered, the equilibrium distribution of infiltrated atoms on the surface and in the crystal volume, as well as the effect of external pressure on the surface and bulk distribution of infiltration atoms, are studied. Knowledge of the processes of redistribution of infiltration atoms along the inter-nodes of a crystal and of the reasons causing them may allow the purposeful formation of these processes for the purpose of obtaining certain physical characteristics of materials. The kinetics of inter-nodal rearrangement of infiltration atoms has been studied for metals and ordering alloys of various structures

Key words: crystal, solid, structure of solids

Ол.Д. Золотаренко^{1,2}, О.П. Рудакова², Ан.Д. Золотаренко^{1,2}, Д.В. Щур^{2*},
Н.А. Гаврилук^{1,2}, Н.Т. Картель¹, О.Д. Золотаренко², В.А. Машира^{1,2}

¹Украина ҰҒА А.А. Чуйко ат. Беттік химия институты, Украина Киев қ.

²Украина ҰҒА И.Н. Францевич ат. Материалтану мәселелері институты, Украина Киев қ.

*email: dmitry.schur@gmail.com

Еркін беті бар ВСС кристалдарының окта- және тетраэдрлік түйіндеріндегі еңгізу атомдар

Кристалдардың физикалық қасиеттері олардың химиялық табиғатымен, бүкіл көлемнің де, беткі қабатының да құрылымымен анықталады. Металлдың, иондық немесе коваленттік кристалдың және жартылай өткізгіштің бетін өзіндік химиясы мен физикасы бар заттың ерекше күйі ретінде қарастыруға болады. Қатты дене беті мәселесіне, бет туралы ғылымға, жұқа қабықшалар физикасына деген қызығушылық қатты дене физикасының жетістіктерімен, техникалық жаңалықтармен, ерекше қасиеттері бар жаңа үлдірлік материалдарды жасау мүмкіндіктерімен, міндеттерімен ынталандырылады. қазіргі заманғы технологияларды, компьютерлік техника мен микроэлектроника құрылғыларын жасауға қойылатын технологиялық талаптар.

Бұл жұмыста біз еңгізу атомдардың беттік және көлемдік аралықтарда қайта таралу процестерін қарастырдық, кристалдың беті және көлемінде еңгізу атомдардың тепе-теңдік таралуын, сонымен қатар, сыртқы қысымның бет пен көлемге әсерін анықтауына зерттеулер жүргіздік. Кристалл аралықтары бойынша еңгізу атомдардың қайта таралу процестерін және оларды тудыратын себептерді білу материалдардың белгілі бір физикалық сипаттамаларын алу үшін бұл процестерді мақсатты түрде қалыптастыруға мүмкіндік береді. Әртүрлі құрылымдағы металдар мен реттелген қорытпалар үшін аралық атомдардың көлемдегі аралықтарға қайта бөліну кинетикасы зерттелді.

Түйін сөздер: кристалл, қатты дене, қатты денелердің құрылымы

Введение

Известно [1-24], что текстура поверхностного слоя металла или сплава оказывает значительное влияние на его физико-механические свойства [25, 26]. Посредством регулирования типа и совершенства текстуры возможно получение металлических пленок с определенными, заранее заданными свойствами. Наиболее распространенным способом нанесения пленок на изделия является электролитическое осаждение, например, хромирование. Одним из недостатков этого способа является насыщение пленок водородом, приводящее к существенному повышению их хрупкости.

Атомы водорода - это атомы внедрения, распределяющиеся по междоузлиям кристалла. Содержание водорода в пленке, т. е. растворимость примеси внедрения, в значительной мере определяется текстурой поверхностного слоя осаждаемого металла. При этом в зависимости от концентрации атомы внедрения располагаются в междоузлиях одного или различных типов на поверхности и в объеме.

Текстура поверхности формируется в зависимости от условий образования кристаллической пленки. Например, при

электролитическом осаждении текстура определяется плотностью электрического тока, скоростью осаждения, толщиной образующейся пленки, природой осаждаемого металла. Так, при хромировании получались текстуры с осями (111), (112), перпендикулярными к поверхности пленки, при повышении скорости осаждения увеличивалась концентрация водорода для текстуры с осью (111) более чем в два раза [27].

Знание характера равновесных распределений атомов внедрения по различным междоузлиям для кристаллов с различной структурой свободной поверхности, знание скоростей процесса перераспределения атомов внедрения или времени релаксации этого процесса может помочь выработке режимов получения кристаллов с определенными свойствами, в частности режимов электролитического нанесения пленок на изделия или проката с целью формирования необходимой текстуры поверхности.

В настоящем параграфе будут рассмотрены случаи распределения внедренных атомов как в окта-, так и в тетраэдрических междоузлиях кристаллов ОЦК структуры со свободными поверхностями (001), (011) или (111) [28-40].

Методы исследования и обсуждение результатов

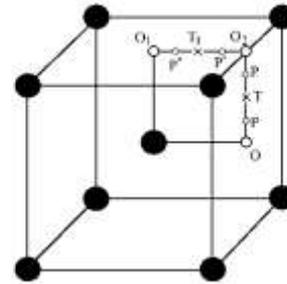
1. Равновесное распределение атомов внедрения в кристалле с поверхностью грани (001)

Представляет интерес распределение внедренных атомов по октаэдрическим O и тетраэдрическим T междуузлиям. На грани (001) можно выделить три типа поверхностных междуузлий: O_1 , O_2 , T_1 . (рис. 1). O -междуузлие в объеме имеет два ближайших соседних узла на расстоянии $0,5a$ и четыре на расстоянии $a/\sqrt{2}$, где a – параметр кубической решетки. T -междуузлие имеет четыре ближайших соседних узла на расстоянии $\sqrt{5}a/4$. Поверхностные междуузлия O_1 , O_2 , T_1 имеют соответственно пять (один на расстоянии $0,5a$ и четыре на расстоянии $a/\sqrt{2}$), четыре (два на расстоянии $0,5a$ и два на расстоянии $a/\sqrt{2}$) и три (все на расстоянии $\sqrt{5}a/4$) ближайших соседних узла. Возможны переходы такого типа: $O \rightarrow T$ (четыре перехода из каждого O -междуузлия), $T \rightarrow O$ (два перехода), $O_1 \rightarrow T_1$ (четыре перехода), $T_1 \rightarrow O_1$ (один переход), $O_2 \rightarrow T_1$ (два перехода), $T_1 \rightarrow O_2$ (один переход), $O_2 \rightarrow T$ (один переход), $T \rightarrow O_2$ (один переход). Последние два перехода обуславливают перераспределение внедренных атомов между поверхностными и объемными междуузлиями. В состоянии термодинамического равновесия число прямых и обратных переходов в единицу времени одинаково. Равновесное заполнение междуузлий внедренными атомами будем характеризовать относительными концентрациями v_i ($i=1, 2, \dots, 5$) соответственно для междуузлий пяти типов: O , T , O_1 , O_2 , T_1 . Концентрации v_i находим с помощью принципа детального равновесия.

Кристаллическую решетку, содержащую $n+1$ кристаллографических плоскостей, параллельных свободной поверхности кристалла, разбиваем на n слоев, каждый из которых имеет толщину a и на единичной площади в объеме содержит N , а на поверхности – $1,25N$ узлов, занятых атомами A . Кроме того, в объемных слоях содержится $3N$ O -междуузлий и $6N$ T -междуузлий (которые могут быть заняты атомами C), а в каждом из поверхностных слоев (рассматривается симметричный случай) содержится $N \approx 1,25N$ узлов, $0,5N$ O_1 -междуузлий, N O_2 -междуузлий и $2N$ T_1 -междуузлий.

Не будем принимать во внимание корреляцию в сплаве, изменения межатомных расстояний, геометрические искажения решетки и объемные эффекты, обусловленные как свободной поверхностью кристалла, так и

атомами внедрения. Воспользуемся моделью парного взаимодействия ближайших атомов, не учитывая взаимодействия внедренных атомов.



● – атомы на узлах решетки; x-o – T - и O -междуузлия; O – вершины потенциальных барьеров P , P' , P'' .

Рисунок 1 – Поверхностные на грани (001) и объемные междуузлия в ОЦК решетке

Если число внедренных атомов C обозначить через ξ для всего кристалла, а через N_1 , N_2 , N_3 , N_4 , N_5 в слое соответственно для междуузлий O , T , O_1 , O_2 , T_1 , относительные концентрации атомов C будут равны:

$$\begin{aligned} v_1 &= \frac{N_1 \left(n - \frac{1}{2}\right)}{\xi}, & v_2 &= \frac{N_2 \left(n - \frac{1}{3}\right)}{\xi}, \\ v_3 &= \frac{2N_1}{\xi}, & v_4 &= \frac{2N_4}{\xi}, & v_5 &= \frac{2N_5}{\xi}. \end{aligned} \quad (1)$$

Изменение относительной концентрации v_i в единицу времени за счет переходов типа $i \rightarrow j$ ($i, j = O, T, O_1, O_2, T_1$) обозначим через R_{ij} . Величины R_{ij} в предположении $\xi \ll N_n$ могут быть представлены в виде [2]

$$R_{ij} = Z_{ij} v_i W_{ij}, \quad (2)$$

где Z_{ij} – число ближайших междуузлий j -го типа вокруг междуузлия i -го типа, а $W_{ij} = \frac{1}{\tau} \exp\left(\frac{\omega_{ij}}{kT}\right)$ / τ – вероятность преодоления потенциального барьера высотой W_{ij} при переходе $i \rightarrow j$, причем $\tau \approx 10^{-13}$ с – постоянная, имеющая смысл среднего времени, в течение которого происходит переход через потенциальный барьер. На поверхности τ_s в общем случае отличается от значения τ_v в объеме. Известно, что для большинства кристаллов $\tau_v/\tau_s \approx 2$ [41]. Величина $\omega_{ij} = v_i - v_p$, где v_i – энергия внедренного атома в i -м междуузлии; v_p – энергия атома C в вершине потенциального барьера при переходе $i \rightarrow j$. Вершинами потенциальных барьеров являются

точки P, P', P'' (рис. 1), которые находятся посередине между O - и T -междоузлиями.

В равновесном состоянии выполняются равенства

$$R_{ij} = R_{ji}, \quad (3)$$

которые с учетом значений Z_{ij} и W_{ij} принимают вид

$$\begin{aligned} 2v_1 \exp \frac{-v_O}{kT} &= v_2 \exp \frac{-v_T}{kT}, \\ 4v_3 \exp \frac{-v_{O_1}}{kT} &= v_2 \exp \frac{-v_{T_1}}{kT}, \\ 4v_4 \exp \frac{-v_{O_2}}{kT} &= v_5 \exp \frac{-v_{T_1}}{kT}, \\ v_4 \exp \frac{-v_{O_2}}{kT} &= \frac{1}{3n} v_2 \frac{\tau_s}{\tau_v} \exp \frac{-v_T}{kT}. \end{aligned} \quad (4)$$

Из полученных уравнений (4), учитывая, что $\sum_{i=1}^5 v_i = 1$, находим равновесные концентрации

$$\begin{aligned} v_1 &= 3nZ^{-1} \frac{\tau_v}{\tau_s} \exp \frac{v_O}{kT}, \\ v_2 &= 6nZ^{-1} \frac{\tau_v}{\tau_s} \exp \frac{v_T}{kT}, \\ v_3 &= Z^{-1} \exp \frac{v_{O_1}}{kT}, \\ v_4 &= 2Z^{-1} \exp \frac{v_{O_2}}{kT}, \\ v_5 &= 4Z^{-1} \exp \frac{v_{T_1}}{kT}, \end{aligned} \quad (5)$$

где

$$\begin{aligned} Z &= 3n \left(\exp \frac{v_O}{kT} + 2 \exp \frac{v_T}{kT} \right) \frac{\tau_v}{\tau_s} + \exp \frac{v_{O_1}}{kT} + \\ &+ 2 \exp \frac{v_{O_2}}{kT} + 4 \exp \frac{v_{T_1}}{kT}. \end{aligned}$$

Формулы (5) определяют зависимость относительных концентраций v_i внедренных атомов в междоузлиях разных типов от температуры. Характер этой зависимости определяется соотношением энергетических параметров $v_O, v_T, v_{O_1}, v_{O_2}, v_{T_1}$. Если, например, $v_O > v_T, v_{O_1}, v_{O_2}, v_{T_1}$, то при $T \rightarrow 0$ имеем $v_1 = 1, v_2 = v_3 = v_4 = v_5 = 0$, а если $v_T > v_O, v_{O_1}, v_{O_2}, v_{T_1}$, то при $T \rightarrow 0$ имеем $v_2 = 1, v_1 = v_3 = v_4 = v_5 = 0$, т.е. с понижением температуры внедренные атомы стремятся уйти с поверхности и занять в объеме междоузлия с наименьшей потенциальной энергией. Если взаимодействие внедренных атомов с узельными носит характер

отталкивания, то при $|v_{O_1}|, |v_{O_2}| > |v_O|$ и $|v_{T_1}| > |v_T|$ поверхность будет обогащаться атомами C и, следовательно, относительные концентрации v_3, v_4 будут больше v_1/n , а v_5 – больше v_2/n . В зависимости от соотношений величин $v_{O_1}, v_{O_2}, v_{T_1}$ внедренные атомы будут упорядоченно располагаться на поверхности кристалла.

При высоких температурах отношения концентраций v_i имеют вид

$$\frac{v_1}{n} : \frac{v_2}{n} : v_3 : v_4 : v_5 = 3 \frac{\tau_v}{\tau_s} : 6 \frac{\tau_v}{\tau_s} : 1 : 2 : 4. \quad (6)$$

2. Влияние толщины кристалла на распределение атомов внедрения. Эффект поверхностной сегрегации

Выражения (5) позволяют выяснить влияние толщины кристалла и отношения τ_s / τ_v на распределение внедренных атомов по междоузлиям разных типов. На рис. 2 приведены результаты расчета зависимости распределения внедренных атомов по различным междоузлиям пластины от величины n при достаточно высоких температурах, когда $kT \gg |v_i|$. Влияние толщины пластины становится заметным при достаточно малых значениях n ($n \leq 10$). При заданном ξ с уменьшением n уменьшается Z , а концентрации $v_1/n, v_2/n, v_3, v_4, v_5$ увеличиваются и растет разность между относительными концентрациями, т.е. распределение внедренных атомов по междоузлиям разных типов становится более контрастным при переходе от кристалла к пленке.

Важным фактором, определяющим перераспределение внедренных атомов между поверхностными и объемными междоузлиями, является отношение τ_v / τ_s . Как видно на рис.3, при $\tau_v > \tau_s$ поверхности обедняются внедренными атомами, а при $\tau_v < \tau_s$, наоборот, – обогащаются (считается, что $kT \gg |v_i|$). Изменение отношения τ_v / τ_s почти не влияет на значения v_1, v_2 относительной концентрации внедренных атомов в объеме кристаллов с $n \gg 1$. При $n \leq 10$ изменение отношения τ_v / τ_s влияет на концентрации v_1, v_2 . Для большинства кристаллов выполняется неравенство $\tau_s < \tau_v$ и внедренные атомы с близкими значениями энергетических параметров ($v_O \approx v_T \approx v_{O_1} \approx v_{O_2} \approx v_{T_1}$) с большей вероятностью будут занимать междоузлия в объеме, образуя поверхностный слой, обедненный этими атомами.

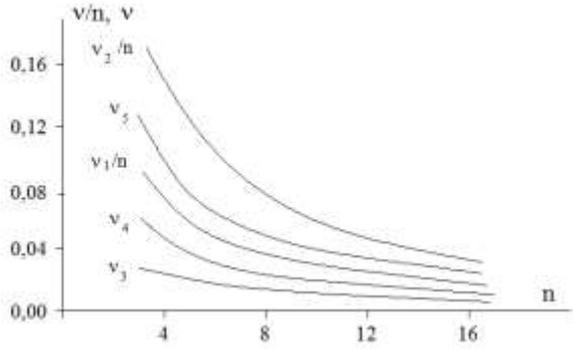


Рисунок 2 – Зависимости равновесных концентраций внедренных атомов в различных междоузлиях от n

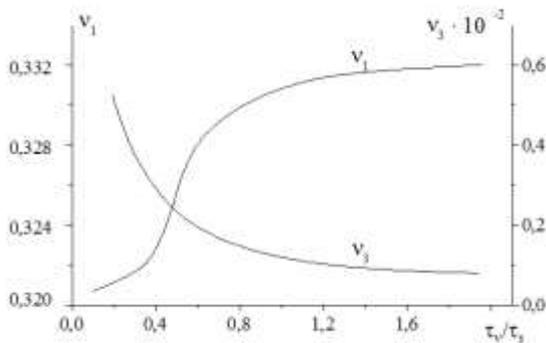


Рисунок 3 – Зависимости равновесных концентраций v_1 , v_3 от отношения τ_v/τ_s .

Наличие на узлах атомов примеси компонента B в металле A приводит к изменению равновесных концентраций v_i . Исследуем такие изменения v_i в простом случае междоузлий двух типов.

Можно ограничиться рассмотрением сплавов с ОЦК решеткой, в которых внедренные атомы могут занимать только T -междоузлия. В таких сплавах распределение внедренных атомов будем описывать при помощи величин v_T и v_{T_1} .

Обозначим взятые с обратным знаком энергии взаимодействия пары ближайших атомов AC и BC , находящиеся на поверхности или в объеме, соответственно \tilde{v}_{AC} , \tilde{v}_{BC} и v_{AC} , v_{BC} . В рамках монослойной модели поверхности [42] энергии атомов в T - и T_1 -междоузлиях представлены в виде

$$|v_T| = 4(C_A v_{AC} + C_B v_{BC}),$$

$$|v_{T_1}| = 2(C'_A \tilde{v}_{AC} + C'_B \tilde{v}_{BC}) + C_A v_{AC} + C_B v_{BC}. \quad (7)$$

Здесь C'_B и C_B – концентрации атомов примеси на узлах решетки на поверхности и в объеме кристалла соответственно [43].

Условия равновесия относительно переходов внедренных атомов между T -междоузлиями на поверхности и в объеме позволяют найти равновесные значения относительных концентраций v_T и v_{T_1} в виде

$$v_T = \left[1 + 2 \frac{\tau_s}{\tau_v} \exp \left(- \frac{3v_{AC} - 2\tilde{v}_{AC} + \Delta}{kT} \right) \right]^{-1}, \quad (8)$$

$$v_{T_1} = 1 - v_T,$$

где

$$\Delta = 3(v_{BC} - v_{AC})C_B - 2(\tilde{v}_{BC} - \tilde{v}_{AC})C'_B.$$

Видно, что добавка атомов B , взаимодействующих с атомами внедрения так, что выполняются равенства $v_{AC} = v_{BC}$ и $\tilde{v}_{AC} = \tilde{v}_{BC}$, не влияет на распределение атомов C по междоузлиям. В общем случае $\Delta \neq 0$ и введение атомов B , приводящих к условию $\Delta > 0$, способствует росту v_T и уходу внедренных атомов с поверхности. В сплавах с $\Delta < 0$ наличие атомов типа B должно приводить к обогащению поверхности атомами C .

Формулы (8) упрощаются в случае сплавов, в которых эффект поверхностной сегрегации атомов на узлах незначителен ($C_B \approx C'_B$) и $C_B \ll 1$, и поэтому можно записать

$$\frac{v_T}{n} = \frac{v_T^0}{n} \left(1 - \frac{1}{G+1} \frac{v_{AC} - v_{BC}}{kT} C_B \right),$$

$$v_{T_1} = v_{T_1}^0 \left(1 - \frac{1}{G+1} \frac{v_{AC} - v_{BC}}{kT} C_B \right), \quad (9)$$

где

$$v_T^0 = (v_T)_{C_B=0}; \quad v_{T_1}^0 = (v_{T_1})_{C_B=0};$$

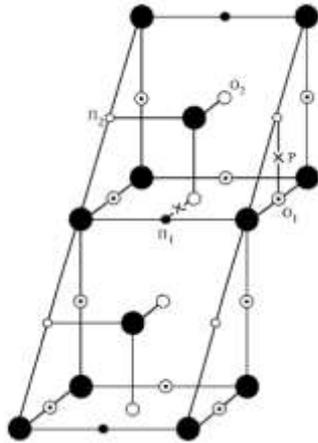
$$G = \frac{1}{2} n \exp \frac{v_{AC}}{kT} > 0.$$

Из выражений (9) следует, что при $v_{AC} - v_{BC} > 0$ введение атомов B в металл A приводит к уменьшению величины v_T и увеличению v_{T_1} и, наоборот, при $v_{AC} - v_{BC} < 0$ - к увеличению v_T и уменьшению v_{T_1} .

Таким образом, введением атомов B можно регулировать процесс вывода внедренных атомов из объема кристалла на поверхность. При наличии экспериментальных результатов распределения внедренных атомов по T -междоузлиям поверхности и объема из (9) можно было бы сделать определенные выводы о значениях параметров межатомного взаимодействия v_{AC} , v_{BC} .

3. Атомы внедрения в кристалле с поверхностью грани (011). Время релаксации

Допустим, что атомы внедрения размещаются в октаэдрических междоузлиях. В объеме это междоузлия O_1 и O_2 (рис. 4). На поверхности потенциальный рельеф плоскости (011) выделяет междоузлия Π_1 и Π_2 . Междоузлия O_1 имеют по два ближайших атома в узлах кристаллической решетки на расстоянии $r_1 = a/2$ и по четыре атома на расстоянии $r_2 = \frac{a\sqrt{2}}{2}$, междоузлия O_2 – по четыре атома на расстоянии r_1 и по два на расстоянии r_2 . Поверхностные междоузлия Π_1, Π_2 имеют соответственно по два ближайших атома на расстоянии r_1 и три на расстоянии r_2 и по три на расстоянии r_1 и два на расстоянии r_2 . При переходе атомов C из O - в Π -междоузлия они преодолевают потенциальный барьер, вершина которого P находится посередине между рассматриваемыми типами междоузлий и имеет четыре ближайших атома на расстоянии $r_3 = \frac{a\sqrt{5}}{4}$ (a – постоянная кристаллической решетки).



● – узлы решетки; ⊙ ○ – объемные междоузлия O_1, O_2 ; ● ○ – поверхностные междоузлия Π_1, Π_2 ; × – вершины потенциальных барьеров.

Рисунок 4 – Грань (011) кристалла ОЦК структуры. Верхний поверхностный слой:

Атомные концентрации компонента C в междоузлиях O_1, O_2, Π_1, Π_2 определяем следующим образом:

$$v_1 = \frac{nN_1}{\xi}, v_2 = \frac{nN_2}{\xi}, v_3 = \frac{2N_3}{\xi}, v_4 = \frac{2N_4}{\xi}, \quad (10)$$

где ξ – полное число атомов C ; N_1, N_2, N_3, N_4 – числа атомов C в позициях O_1, O_2, Π_1, Π_2 одного

атомного слоя, на которые разбит кристалл.

Равновесные значения концентраций v_i равны:

$$v_1^0 = 3nx^{-1} \exp \frac{v_{O_1}}{kT}, v_2^0 = 3nx^{-1} \exp \frac{v_{O_2}}{kT},$$

$$v_3^0 = x^{-1} \exp \frac{v_{\Pi_1}}{kT}, v_4^0 = x^{-1} \exp \frac{v_{\Pi_2}}{kT}, \quad (11)$$

где

$$x = 3n \exp \frac{v_{O_1}}{kT} + 3n \exp \frac{v_{O_2}}{kT} + \exp \frac{v_{\Pi_1}}{kT} + \exp \frac{v_{\Pi_2}}{kT}.$$

По формуле (11) находим зависимость относительных атомных концентраций v_i^0 от температуры. При высоких температурах ($T \rightarrow \infty$) отношение концентраций в слое определяется соотношением

$$\frac{v_{O_1}}{n} : \frac{v_{O_2}}{n} : \frac{v_{\Pi_1}}{2} : \frac{v_{\Pi_2}}{2} = 6 : 6 : 1 : 1,$$

т.е. отношение концентраций атомов внедрения в слое определяется отношением чисел междоузлий каждого типа, и атомы C распределяются равномерно по объему и поверхностям независимо от n . С понижением температуры атомы C стремятся занять те междоузлия, в которых их потенциальная энергия минимальна.

Допустим, что температура кристалла скачком изменяется от значения T_1 до T_2 . Если энергии атомов C в O -междоузлиях и, соответственно, в Π -междоузлиях отличаются слабо, так что можно положить $v_O \cong v_{O_1} \cong v_{O_2}$, $v_{\Pi} \cong v_{\Pi_1} \cong v_{\Pi_2}$, то время релаксациитемпературного перераспределения атомов C по позициям разного типа будет равно

$$t^* = \tau \left[2n \exp \frac{-(v_{\Pi} - v_P)}{kT_2} + \exp \frac{-(v_O - v_P)}{kT_2} \right], \quad (12)$$

где положено $\tau \cong \tau_S \cong \tau_v \approx 10^{-13}$ с. Таким образом, скорость перераспределения внедренных атомов, обратно пропорциональная времени релаксации, определяется температурой пленки, ее толщиной, структурой, составом (в случае сплава) и энергетическими параметрами. Число атомных слоев в кристалле оказывает сильное влияние на время релаксации в случае тонких пленок. Если время релаксации оценено экспериментально с достаточной степенью точности при различных температурах,

уравнение (12) позволяет определить энергетические параметры системы.

4. Атомы внедрения в кристалле с поверхностью грани (111)

Рассмотрим распределение внедренных атомов по окта- и тетра-междуузлиям в объеме и поверхностном монослое металла ОЦК структуры со свободной поверхностью грани (111), на которой потенциальный рельеф кристалла выделяет поверхностные позиции Π_1 , Π_2 , находящиеся на самой поверхности, и Π_3 , Π_4 в приповерхностном монослое (рис.5).

Атомные концентрации компонента внедрения в междуузлиях определяем следующим образом:

$$\begin{aligned} v_0 &= \frac{nN_0}{\xi}, v_T = \frac{nN_T}{\xi}, v_{\Pi_1} = \frac{N_{\Pi_1}}{\xi}, \\ v_{\Pi_2} &= \frac{N_{\Pi_2}}{\xi}, v_{\Pi_3} = \frac{N_{\Pi_3}}{\xi}, v_{\Pi_4} = \frac{N_{\Pi_4}}{\xi}. \end{aligned} \quad (13)$$

Эти концентрации связаны условием нормировки

$$v_0 + v_T + v_{\Pi_1} + v_{\Pi_2} + v_{\Pi_3} + v_{\Pi_4} = 1.$$

Расчет равновесных концентраций v_i дает следующий результат

$$\begin{aligned} v_0 &= 3n\chi^{-1} \exp \frac{v_0}{kT}, \\ v_T &= 6n\chi^{-1} \exp \frac{v_T}{kT}, \\ v_{\Pi_1} &= 3\chi^{-1} \exp \frac{v_{\Pi_1}}{kT}, \\ v_{\Pi_2} &= \chi^{-1} \exp \frac{v_{\Pi_2}}{kT}, \\ v_{\Pi_3} &= 6\chi^{-1} \exp \frac{v_{\Pi_3}}{kT}, \\ v_{\Pi_4} &= 3\chi^{-1} \exp \frac{v_{\Pi_4}}{kT}, \end{aligned} \quad (14)$$

где v_i – энергия внедренного атома в i -м междуузлии, определяемая суммой энергий взаимодействия с ближайшими соседними атомами в узлах кристаллической решетки, а

$$\begin{aligned} \chi &= 3n \exp \frac{v_0}{kT} + 6n \exp \frac{v_T}{kT} + 3n \exp \frac{v_{\Pi_1}}{kT} + \\ &+ \exp \frac{v_{\Pi_2}}{kT} + 6 \exp \frac{v_{\Pi_3}}{kT} + 3 \exp \frac{v_{\Pi_4}}{kT}. \end{aligned}$$

По формуле (14) рассчитываем зависимость относительных равновесных концентраций v_i от температуры и энергетических параметров.

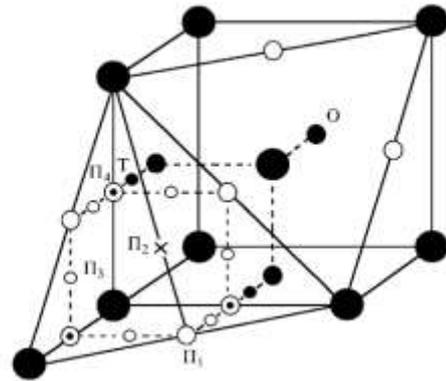
При высоких температурах ($T \rightarrow \infty$) отношение концентраций удовлетворяет равенству

$$\frac{v_0}{n} : \frac{v_T}{n} : v_{\Pi_1} : v_{\Pi_2} : v_{\Pi_3} : v_{\Pi_4} = 3 : 6 : 3 : 1 : 6 : 3,$$

т.е. отношение концентраций внедренных атомов в слое определяется отношением чисел междуузлий каждого типа, и атомы внедрения распределяются равномерно по объемным и поверхностным междуузлиям.

При низких температурах ($T \rightarrow 0$) атомы внедрения будут занимать те междуузлия, в которых их потенциальная энергия минимальна, т.е. в зависимости от соотношений между энергетическими параметрами.

Для каждого конкретного кристалла эти междуузлия могут быть названы, если известны энергии межатомного взаимодействия для различных межатомных расстояний, иными словами, если известна зависимость энергии взаимодействия атомов внедрения с атомами узлов кристалла от расстояния между ними.



● – узлы решетки; ●● – объемные окта- и тетраэдрические междуузлия; ○ ⊗ – поверхностные позиции Π_1 , Π_2 ; ⊗ ○ – приповерхностные позиции Π_3 , Π_4 .

Рисунок 5 – Расположение окта- и тетраэдрических междуузлий в ОЦК решетке со свободной гранью (111):

Полученные выше формулы (10), (5), (11), (14) определяют равновесные концентрации атомов внедрения для различных частных случаев, когда атомы С распределяются только в окта- и тетраэдрических междуузлиях в объеме, в поверхностных междуузлиях, которые являются окта- или тетраэдрическими, но с меньшей узловой координацией, в поверхностных, которые выделяет потенциальный рельеф

последней и которых нет в объеме, а также для различных частных случаев, когда свободной поверхностью кристалла является грань (111) или (011) или (001).

Сопоставляя формулы (10), (5), (11), (14) для равновесного распределения атомов С в различных позициях, можно выяснить влияние текстуры поверхностного слоя металла или сплава, его состава (в том числе с учетом эффекта поверхностной сегрегации) на растворимость примеси внедрения и предопределить последнюю для различных структур свободной грани кристалла и предсказать, какие грани кристалла должны быть свободными, чтобы получить требуемую растворимость примеси внедрения, способствующую формированию определенных физических свойств материала.

Выводы

В заключение следует отметить, что уточнение теории может быть проведено в направлении учета релаксации поверхности, наличия особых поверхностных состояний, корреляции в заполнении узлов и междоузлий решетки атомами, изменения межатомных расстояний, геометрических искажений решетки, атомного упорядочения как на узлах, так и по междоузлиям, а также учета объемных эффектов, обусловленных внедренными атомами С, размерным фактором атомов А и В, свободной поверхностью кристалла.

Литература

1. Buschow K.H.J., Bouten P.C.P., Miedema A.R. Hydrides formed from intermetallic compounds of two transition metals: a special class of ternary alloys // Rep. Prog. Phys. – 1982. – Vol. 45, № 9. – P.937-1039.
2. Смирнов А.А. Теория сплавов внедрения. – М.: Наука, 1979. – 368 с.
3. Смирнов А.А. Кинетика процессов перераспределения внедренных атомов по междоузлиям разного типа // Физ. мет.и металловед. – 1975. – Т.39. – С. 268.
4. Смирнов А.А. О перераспределении внедренных атомов по октаэдрическим междоузлиям упорядочивающегося сплава с ОЦК решеткой // Укр. физ. журн. – 1975. – Т. 20. – С.1937.
5. Бугаев В.Н., Матысина З.А., Рыжков В.И., Смирнов А.А. Перераспределение атомов внедрения по окта- и тетраэдрическим междоузлиям упорядочивающихся сплавов с ОЦК решеткой // Металлофизика. – 1977. – Вып. 70. – С.6-11.
6. Бугаев В.Н., Матысина З.А., Рыжков В.И., Смирнов А.А. Перераспределение атомов внедрения в упорядочивающихся сплавах со структурой типа Cu₃Au // Укр. физ. журн. – 1977. – Т.22. – С.827-832.
7. Бугаев В.И., Матысина З.А., Рыжков В.И., Смирнов А.А. О распределении атомов внедрения по октаэдрическим порам упорядочивающихся сплавов со структурой типа CuAu // Изв. вузов СССР. Физика. – 1977. – № 3. – С.105-109.
8. Еременко А.М., Загинайченко С.Ю., Льяной В.Н., Матысина З.А. Кинетика термических перераспределений атомов внедрения в металлах и сплавах, время релаксации // Метастабильные фазовые состояния – теплофизические свойства и кинетика релаксации. – Свердловск: УрГУ, 1989. – Т. 2. – С.65-66.
9. Еременко А.М., Загинайченко С.Ю., Матысина З.А., Милян М.И. Равновесное распределение и перераспределение атомов азота в бинарных атомноупорядочивающихся сплавах // Высокоазотистые стали. – Киев: Изд. ИМФ АН Украины, 1990. – С.351-357.
10. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. – М.- Л.: Гостехтеориздат, 1951.
11. Новик А., Берри Б. Релаксационные явления в кристаллах. – М.: Атомиздат, 1975. – 472 с.
12. Gemmel D.S. Channeling and related effects in the motion of charged particles through crystals // Rev. of Mod. Phys. – 1974. – Vol. 46. – P.129-227.
13. Салли И.В., Льяной В.Н., Пясецких И.И. Углерод на поверхности растворов внедрения. – Киев: Наук.думка, 1973. – 150 с.
14. Смитлз К.Дж. Металлы: (Справ.) – М.: Металлургия, 1980. – 446 с.
15. Дриц М.Е. Свойства элементов: (Справ.) – М.: Металлургия, 1985. – 671 с.
16. Самсонов Г.В. Свойства элементов Ч. 1. Физические свойства. – М.: Металлургия, 1976. – 600 с.
17. Темкин Д.Е. Оценка активационного объема при диффузии в растворах внедрения // Физ. мет.и металловед. – 1970. – Т. 29, № 3. – С.589-597.
18. Славинский М.Д. Физико-химические свойства элементов. – М.: Металлургиздат, 1952. – 358 с.
19. Хансен М., Андерко К. Структуры двойных сплавов. – М.: Металлургиздат, 1962. – т. 1. – 608 с.; т. 2. – 877 с.
20. Курдюмов А.А., Лясников В.Н., Швачкина Т.А. Газовыделение и сорбция водорода плазмонапыленным титаном // Журн. физ. хим. – 1982. – Т. 56, № 1. – С.155-157.
21. Большов Л.А., Напартович А.П., Наумовец А.Г., Федорус А.Г. Субмонослойные пленки на поверхности металлов // Укр. физ. журн. – 1977. – Т. 122, № 1. – С.125-158.

22. Matysina Z.A., Ovrutskii A.M., Chuprina L.M. Influence of correlation and anisotropy on the molecular roughness of the crystal face // *Phys. Stat. Sol. (a)*. – 1985. – Vol.92. – P.K93-K97.
23. Матысина З.А., Овруцкий А.М., Чуприна Л.М. Анализ шероховатости границы раздела анизотропного кристалла с расплавом // *Деп. № 3584-85*. – М.: ВИНТИ, 1985. – 29 с. // *Известия вузов СССР. Физика*. – 1985. – № 10. – С.124.
24. Люксютов И.Ф. Двумерные анизотропные кристаллы // *Журн. эксп. теор. физ.* – 1982. – Т. 82, № 4. – С. 1267-1276.
25. Гирин О.Б., Воробьев Г.М. Текстура хромовых покрытий, осажденных электролитически из водных растворов // *Известия АН СССР. Металлы*. – 1983. – № 4. – С.164-168.
26. Гирин О.Б., Воробьев Г.М. Влияние текстуры на износостойкость электролитических хромовых покрытий // *Там же*. – 1983. – № 5. – С.189-191.
27. Гирин О.Б., Загинайченко С.Ю., Риздвянецкий Д.Р., Шелудяков В.А. Атомы внедрения в металлах со свободной поверхностью // *Вопросы формирования метастабильной структуры сплавов*. – Днепропетровск: ДГУ, 1985. – С.77-81.
28. Бобырь А.М., Матысина З.А., Рыжков В.И. Равновесное распределение внедренных атомов на поверхности и в объеме кристалла // *Укр. физ. журн.* – 1984. – Т. 29. – С.92-96.
29. Матысина З.А., Милан М.И., Загинайченко С.Ю., Гирин О.Б. Перераспределение атомов внедрения в объеме и на поверхности кристаллической пленки // *Вопросы формирования метастабильной структуры сплавов*. – Днепропетровск: ДГУ, 1984. – С.191-195.
30. Загинайченко С.Ю., Матысина З.А., Рыжков В.И. Атомы на поверхности и в объеме кристалла // *Деп. № 6202 – В87*. – М.: ВИНТИ, 1987. – 240 с.
31. Matysina Z.A., Milyan M.I., Zaginaichenko S.Yu. Surface and volumetric distribution of impurity atoms in films and massive crystals // *Proceed. MICC – 90*. – London – New York – Elsevier // *Appl. Sci.* – 1991. – P.516-519.
32. Chuprina L.M., Matysina Z.A., Klenina S.Ya., Zaginaichenko S.Yu. Surface segregation in solid solution. Surface roughness. Computer simulation // *Proceed. YAPOFRI-91, Yaroslavl, USSR*. – 1991. – Vol.2. – P.267-272.
33. Matysina Z.A., Pogorelova O.S., Zaginaichenko S.Yu. The solubility and distribution of hydrogen atoms in octahedral, tetrahedral and triangular interstitial sites of ordering alloys // *Proceed. 9th World Hydrogen Energy Conf., France, Paris.: IAHE*. – 1992. – Vol.2. – P.979-987.
34. Matysina Z.A., Pogorelova O.S., Zaginaichenko S.Yu. The solubility and distribution of hydrogen atoms in ordering alloys // *Int. J. Hydrogen Energy*. – 1993. – Vol. 18, No 12. – P.1001 – 1008.
35. Matysina Z.A., Pogorelova O.S., Zaginaichenko S.Yu. The solubility and distribution of atomic interstitial impurity at octahedral-, tetra- and some triangular alloy interstitial sites // *Proceed. 3rd Int. Conf. High Nitrogen Steels*. – Kiev: Inst. Met. – 1993. – Vol.1. – P.101-105.
36. Matysina Z.A., Zaginaichenko S.Yu. Schur D.V. The solubility of nitrogen in iron with Co, Ni, Si, Mn or V impurity and of carbon in Fe-Ni alloys // *Proceed. 6th Int. Conf. «Carbides, nitrides, borides», Poland. Poznan Univ.* – 1993. – P.22-25.
37. Zaginaichenko S.Yu., Matysina Z.A., Schur D.V. Hydrogen atoms on the surface and in the volume of crystals. – USA, Florida, Cocoa Beach. – 1994. – Vol.2. – P.1303-1309.
38. Zaginaichenko S.Yu., Matysina Z.A., Schur D.V., Pishuk V.K. Theoretical study of hydrogen influence on the energy state of crystals. Hydrogen solubility // *Proceed. Florence World Energy Research Symp. «Clean Energy of the New Century»*. – Italy, Florence. – 1997. – P.453-460.
39. Zaginaichenko S.Yu., Matysina Z.A., Schur D.V. An investigation of surface and volumetric distribution of interstitial impurity atoms in films and massive crystals // *Proceed. 6th Annual Int. Conf. Composites Engineering*. – USA, Florida, Orlando, 1999. – P.931-932.
40. Schur D.V., Matysina Z.A., Zaginaichenko S.Yu. Theoretical study of interstitial atoms distribution in the bulk and at the surface of crystal. Surface segregation // *J. Alloys and Compounds*. – 2002. – Vol. 330-332, № 1. – P.81-84.
41. Марадурин А. Дефекты и колебательный спектр кристаллов. – М.: Мир, 1968. – 432 с.
42. Williams F.L., Nason D. Binary alloy surface compositions from bulk alloy thermodynamic data // *Surface Sci.* – 1974. – V. 45, № 2. – P.377-408.
43. Moran-Lopes J.L., Falicov L.M. Theory of surface effects in binary alloy // *Phys. Rev. B*. – 1978. – Vol. 18, № 6. – P.2542-2554.

References

- 1 K.H.J. Buschow, P.C.P. Bouten, & A.R.Miedema, *Rep. Prog. Phys.* 45(9), 937-1039 (1982).
- 2 A.A. Smirnov *Teoriya splavov vnedreniy*, (Moscow, Nauka, 1979), 368 p. (in Russ).
- 3 A.A. Smirnov, *Fiz. met. i metalloved.*, 39, 268 (1975). (in Russ).
- 4 A.A. Smirnov, *Ukr. fiz.Ukr. fiz. zhurn.*, 20, 1937 (1975).(in Russ).
- 5 V.N. Bugaev, Z.A. Matysina, V.I. Ryzhkov, A.A. Smirnov, *Metallofizika* 70, 6-11 (1977). (in Russ).
- 6 V.N. Bugaev, Z.A. Matysina, V.I. Ryzhkov, A.A. Smirnov, *Ukr. fiz.zhurn.*, 22, 827-832 (1977). (in Russ).

- 7 V.N. Bugaev, Z.A. Matysina, V.I. Ryzhkov, A.A. Smirnov, *Izv. Vuzov. SSSR*, 3, 105-109, (1977). (in Russ).
- 8 A.M. Eremenko, S.Yu. Zaginaichenko, V.N. Linyanoy, Z.A. Matysina, *Metastabilnye fazovye sostoyaniya – teplofizicheskie svoystva i kinetika relaksacii*, Sverdlovsk. UrGU, 2, 65-66 (1989). (in Russ).
- 9 A.M. Eremenko, S.YU. Zaginajchenko, Z.A. Matysina, M.I. Milyan, *Vysokoazo-tistye stali*, Kiev: Izd. IMF AN Ukrainy, 351-357 (1990). (in Russ).
- 10 L.D. Landau, E.M. Lifshic, *Statisticheskaya fizika*, (Moscow, Gostekhizdat, 1951) (in Russ).
- 11 A. Novik, B. Berri, *Relaksacionnye yavleniya v kristallah*, (Moscow, Atomizdat, 1972), 472 p. (in Russ).
- 12 D.S. Gemmel, *ev. of Mod. Phys.*, 46, 129-227 (1974).
- 13 I.V. Salli, V.N. L'nyanoy, *Pyaseckih I.I. Uglerod na poverhnosti rastvorov vnedreniya*, (Kiev, Nauk. dumka, 1973), 150 p. (in Russ).
- 14 K.Dzh. Smitlz, *Metally (Sprav.)*, (Moscow, Metallurgiya, 1980), 446 p. (in Russ).
- 15 M.E. Dric, *Svoystva elementov (Sprav.)*, (Moscow, Metallurgiya, 1985), 671 p. (in Russ).
- 16 G.V. Samsonov, *Svoystva elementov 1, Fizicheskie svoystva*, (Moscow, Metallurgiya, 1976) 600 p. (1976). (in Russ).
- 17 D.E. Temkin, *Fiz. met. i metalloved*, 29 (3), 589-597 (1970). (in Russ).
- 18 M.D. Slavinskij, *Fiziko-himicheskie svoystva elementov*, (Moscow, Metallurgizdat, 1972), 358 p. (in Russ).
- 19 M. Hansen, K. Anderko, *Struktury dvoynyh splavov*, (Moscow, Metallurgizdat, 1962), 1, 608 p., 2, 877 p. (in Russ).
- 20 A.A. Kurdyumov, V.N. Lyasnikov, T.A. SHvachkina, *Jurn. fiz. him.*, 56 (1), 155-157 (1982). (in Russ).
- 21 L.A. Bol'shov, A.P. Napartovich, A.G. Naumovec, A.G. Fedorus, *Ukr. fiz. zhurn.*, 122(1), 125-158 (1977). (in Russ).
- 22 Z.A. Matysina, A.M. Ovrutskii & L.M. Chuprina, *Phys. Stat. Sol. (a)*, 92, K93-K97 (1985).
- 23 Z.A. Matysina, A.M. Ovruckij, L.M. CHuprina, *Izvestiya vuzov SSSR. Fizika.*, 10, 124 (1985). (in Russ).
- 24 I.F. Lyuksyutov, *Jurn. eksp. teor. fiz.*, 82(4), 1267-1276 (1982). (in Russ).
- 25 O.B. Girin, G.M. Vorob'ev, *Izvestiya AN SSSR. Metally*, 4, 164-168 (1983). (in Russ).
- 26 O.B. Girin, G.M. Vorob'ev, *Izvestiya AN SSSR. Metally*, 5, 189-191 (1983). (in Russ).
- 27 O.B. Girin, S.YU. Zaginajchenko, D.R. Rizdvyanekij, V.A. SHELudyakov, *Voprosy formirovaniya metastabil'noj struktury splavov*, (Dnepropetrovsk: DGU, 1985), 77-81. (in Russ).
- 28 A.M. Bobyr', Z.A. Matysina, V.I. Ryzhkov, *Ukr. fiz. zhurn.*, 29, 92-96, (1984). (in Russ).
- 29 Z.A. Matysina, M.I. Milyan, S.YU. Zaginajchenko, O.B. Girin, *Voprosy formirovaniya metastabil'noj struktury splavov*, (Dnepropetrovsk: DGU, 1984), 191-195. (in Russ).
- 30 S.YU. Zaginajchenko, Z.A. Matysina, V.I. Ryzhkov, *Dep.*, 6202(87), (Moscow, VINITI, 1987), 240 p. (in Russ).
- 31 Z.A. Matysina, M.I. Milyan & S.Yu. Zaginaichenko, *Applend Sci*, 516-519 (1991).
- 32 L.M. Chuprina, Z.A. Matysina, S.Ya. Klenina & S.Yu. Zaginaichenko, *Proceed. YAPOFRI-91*, 2, 267-272 (1991).
- 33 Z.A. Matysina, O.S. Pogorelova & S.Yu. Zaginaichenko, *Proceed. 9th World Hydrogen Energy Conf.*, France, Paris: IAHE, 2, 979-987 (1992).
- 34 Z.A. Matysina, O.S. Pogorelova & S.Yu. Zaginaichenko, *Int. J. Hydrogen Energy*, 18(12), 1001-1008 (1993).
- 35 Z.A. Matysina, O.S. Pogorelova & S.Yu. Zaginaichenko, *Proceed. 3rd Int. Conf. High Nitrogen Steels*, Kiev, Inst. Met, 1, 101-105 (1993).
- 36 Z.A. Matysina, S.Yu. Zaginaichenko & D.V. Schur, *Proceed. 6th Int. Conf. «Carbides, nitrides, borides»* (Poland. Poznan Univ., 1993), 22-25 p.
- 37 S.Yu. Zaginaichenko, Z.A. Matysina & D.V. Schur, *Hydrogen atoms on the surface and in the volume of crystals*, USA, Florida, Cocoa Beach, 2, 1303-1309 (1994).
- 38 S.Yu. Zaginaichenko, Z.A. Matysina, D.V. Schur & V.K. Pishuk, *Proceed. Florence World Energy Research Symp. «Clean Energy of the New Century»* (Italy, Florence, 1997), 453-460 p.
- 39 S.Yu. Zaginaichenko, Z.A. Matysina & D.V. Schur, *Proceed. 6th Annual Int. Conf. Composites Engineering*. (USA, Florida, Orlando, 1999), p. 931-932.
- 40 D.V. Schur, Z.A. Matysina & S.Yu. Zaginaichenko, *J. Alloys and Compounds.*, 330-332(1), 81-84 (2002).
- 41 A. Maradurin, *Defekty i kolebatel'nyj spektr kristallov*, (Moscow, Mir, 1968), 432 p. (in Russ).
- 42 F.L. Williams & D. Nason, *Surface Sci.*, 45(2), 377-408 (1974).
- 43 J.L. Moran-Lopes & L.M. Falicov, *Phys. Rev. B*, 18(6), 2542-2554 (1978).

IRSTI 29.19.21 29.15.53

<https://doi.org/10.26577/RCPH.2022.v81.i2.010>Zh.T. Buggybay^{1,2*}, M.T. Aitkulov¹, E.E. Beisenova², A.M. Akhanov¹¹Institute of Nuclear Physics, Kazakhstan, Almaty²Satbayev University, Kazakhstan, Almaty

*e-mail: zh.buggybay@inp.kz

APPLICATION OF THE NEUTRON RADIOGRAPHY METHOD TO STUDY THE MIGRATION OF LITHIUM IONS IN ELECTRIC BATTERIES DURING DISCHARGE

Li-ion batteries are widely used in modern technology as a reliable and stable power source. They are a pair of electrodes separated by a special material impregnated with electrolyte. The charge carriers in such devices are lithium ions. One of the factors affecting the performance of such batteries is the migration of lithium ions. Studies have shown that anisotropic migration of lithium ions on the electrode leads to local lattice dislocations. As a result, the structure of the anode ceases to be heterogeneous, which leads to inefficient movement of charges in it and, accordingly, to a decrease in battery efficiency [1]. Therefore, new types of lithium-ion batteries with increased efficiency are being developed and existing ones are being improved. To this end, research is being carried out, in particular to investigate the migration processes and behavior of lithium in batteries. One of the effective non-destructive methods for such studies is neutron radiography, as the total microscopic cross section of ⁶Li interaction with neutrons is about 940 barns [2]. In addition, modern neutron radiography facilities allow us to *in situ* study the internal processes in lithium-ion batteries.

This article presents the results of a real-time study of the distribution of lithium in two commercial types of lithium-ion batteries during their discharge. The research was carried out by a non-destructive method at the TITAN neutron radiography facility. As a result of the research, experimental data were obtained on the migration and distribution of lithium in batteries in different states. It is shown that when the battery is discharged, lithium ions migrate to the cathode at a rate of 0.83×10^{-5} and 0.36×10^{-4} cm/s.

Key words: LIB, neutron radiography, WWR-K, migration of lithium ions.

Ж.Т. Бұғыбай^{1,2*}, М.Т. Айтқұлов¹, Е.Е. Бейсенова², А.М. Аханов¹¹Ядролық физика институты, Қазақстан, Алматы қ.²Satbayev University, Қазақстан, Алматы қ.

*e-mail: zh.buggybay@inp.kz

Электрлік аккумуляторлардағы литий иондарының разряд кезіндегі миграциясын зерттеу үшін нейтронды рентгенография әдісін қолдану

Литий-ионды батареялар сенімді және тұрақты қуат көзі ретінде заманауи технологияда кеңінен қолданылады. Олар электролитпен сіңдірілген арнайы материалмен бөлінген жұп электродтардан тұрады. Мұндай құрылғылардағы заряд тасымалдаушылар литий иондары болып табылады. Мұндай батареялардың жұмысына әсер ететін факторлардың бірі литий иондарының миграциясы болып табылады. Зерттеулер көрсеткендей, литий иондарының электродтағы анизотропты миграциясы кристалдық тордың жергілікті дислокациясының пайда болуына әкеледі. Нәтижесінде анодтың құрылымы біртекті болуды тоқтатады, бұл ондағы зарядтардың тиімсіз қозғалуына және сәйкесінше батареяның тиімділігінің төмендеуіне әкеледі [1]. Сондықтан тиімділігі жоғары литий-иондық батареялардың жаңа және жетілдірілген түрлері әзірленуде. Ол үшін көптеген зерттеулер, атап айтқанда, батареялардағы литийдің миграция процесі мен литий иондарының қозғалыс жылдамдықтарын зерттеуге бағытталған. Мұндай зерттеулердің тиімді әдістерінің бірі нейтрондық радиография бұзбайтын әдісі болып табылады, өйткені ⁶Li нейтрондармен әрекеттесуінің жалпы микроскопиялық қимасы шамамен 940 барн ды құрайды [2]. Сонымен қатар, қазіргі заманғы нейтронды радиография қондырғылары литий-иондық аккумуляторлардағы ішкі процестерді нақты уақыт режимінде зерттеуге мүмкіндік береді.

Бұл мақалада литий-ионды аккумуляторлардың екі коммерциялық түріне литийдің нақты уақыт режимінде зарядсыздану кезінде таралуын зерттеу нәтижелері берілген. Зерттеулер ТІТАН нейтронды радиографиялық қондырғыда бұзылмайтын әдіспен жүргізілді. Зерттеу нәтижесінде әртүрлі күйдегі аккумуляторлардағы литийдің миграциясы және таралуы туралы тәжірибелік деректер алынды. Батарея зарядсызданған кезде литий иондары катодқа $0,83 \cdot 10^{-5}$ және $0,36 \cdot 10^{-4}$ см/с жылдамдығымен көшетіні көрсетілген.

Түйін сөздер: ЛИБ, нейтрондық радиография, ССР-Қ, литий ионының миграциясы.

Ж.Т. Бугыбай^{1,2*}, М.Т. Айткулов¹, Е.Е. Бейсенова², А.М. Аханов¹

¹Институт ядерной физики, Казахстан, г. Алматы

²Satbayev University, Казахстан, г. Алматы

*e-mail: zh.buggybay@inp.kz

Применение метода нейтронной радиографии для исследования миграции ионов лития в электрических батареях в процессе разряда

Литий-ионные батареи широко используются в современной технике в качестве надежного и стабильного источника питания. Они представляют собой пару электродов, разделенных специальным материалом пропитанным электролитом. Носителями заряда в таких устройствах являются ионы лития. Одним из факторов, влияющим на работу таких батарей, является миграция ионов лития. Исследования показали, что анизотропная миграция ионов лития на электроде приводит к возникновению локальных дислокаций кристаллической решетки. В результате этого структура анода прекращает быть неоднородной, что приводит к неэффективному передвижению зарядов в нем и соответственно к снижению эффективности батареи [1]. Поэтому разрабатываются новые и улучшаются существующие типы литий-ионные батареи с повышенной эффективностью. Для чего проводятся исследования, в частности, направленные на изучение процессов миграции и поведения лития в батареях. Одним из эффективных неразрушающих методов таких исследований является нейтронная радиография, поскольку полное микроскопическое сечение взаимодействия ${}^6\text{Li}$ с нейтронами составляет около 940 барн [2]. Кроме того, современные установки нейтронной радиографии позволяют исследовать внутренние процессы в литий-ионных батареях в режиме реального времени.

В настоящей статье приведены результаты исследования распределения лития в двух коммерческих типах литий-ионных батареях в процессе их разрядки в режиме реального времени. Исследования проведены неразрушающим методом на установке нейтронной радиографии ТІТАН. В результате проведенных исследований были получены экспериментальные данные о миграции и распределении лития в батареях в разных состояниях. Показано, что при разрядке батареи происходит миграция ионов лития к катоду со скоростью $0,83 \cdot 10^{-5}$ и $0,36 \cdot 10^{-4}$ см/с.

Ключевые слова: ЛИБ, нейтронная радиография, ВВР-К, миграция ионов лития.

Introduction

Lithium-ion batteries (LIBs) have the best complex characteristics among currently existing secondary batteries, due to high energy density, long service life, non-toxicity, absence of environmental pollution, flexibility and lightness of design [3]. Currently, LIBs are widely used to power portable electronic devices. The LIB consists of three main components: electrode materials (cathode and anode), electrolyte and current collectors. During the electrochemical reaction in the electrodes, the distribution of lithium ions on the surface and inside the electrode is different, which manifests as a concentration gradient of lithium ions, which in turn

leads to the migration of lithium ions. In most cases the migration of lithium ions plays an important role in the kinetic processes occurring in the electrode materials, as the migration determines the reaction rate in the electrode materials and as a result the speed characteristics of the electrode [4, 5]. Lithium ion migration also affects lattice deformation, which is crucial in limiting battery life. For this reason a great deal of attention has been paid to research into the materials and processes involved in lithium-ion batteries [6-10]. Methods such as X-ray powder diffraction, X-ray photoelectron spectroscopy and other methods are used to study the migration of lithium ions. [11]. One of the effective methods of studying the migration of lithium ions in LIBs is the

non-destructive method of neutron radiography. As the following nuclear reaction takes place on lithium: ${}^6\text{Li} + n \rightarrow {}^3\text{H} + {}^4\text{He} + 4.78 \text{ MeV}$. The total cross-section of the interaction of this nuclear reaction is about 940 barns. In this work, the method of neutron radiography and tomography was used to study the migration and distribution of lithium ions in commercial types of lithium-ion batteries during their discharge.

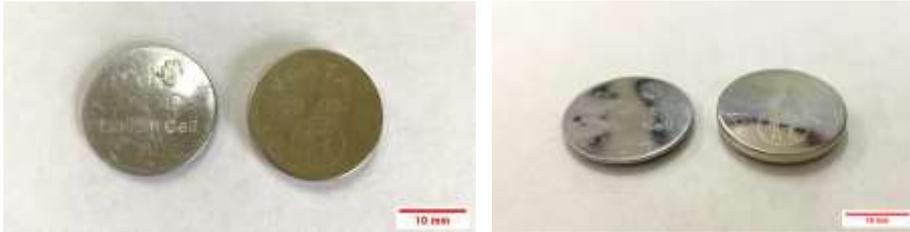


Figure 1 – Outside view of the tested batteries

The cathode in the two types of battery is manganese dioxide and the anode is lithium. The batteries also use an organic electrolyte and a polypropylene separator. The battery case is made of stainless steel.

Neutron radiography and tomography were used to study the migration process of lithium ions in these types of batteries. The essence of the neutron radiography method is that the object under study is

Materials and methods

In this paper, two types of commercial lithium-ion batteries were investigated: CR2016 and CR2032. The CR2016 battery has a diameter of 20 mm and a thickness of 1.6 mm. The electrical capacity of the battery is 90 mAh. The CR2032 battery has a diameter of 20 mm and is 3.2 mm thick. The electrical capacity of the battery is 230 mAh. The sample batteries are shown in figure 1.

irradiated with a collimated neutron flux, where the difference in neutron absorption cross sections for different elements of the object provides information about the internal distribution of inhomogeneities of the materials under study. The detector records the distribution of the neutron flux behind the object. The neutron radiography method is shown schematically in Figure 2.

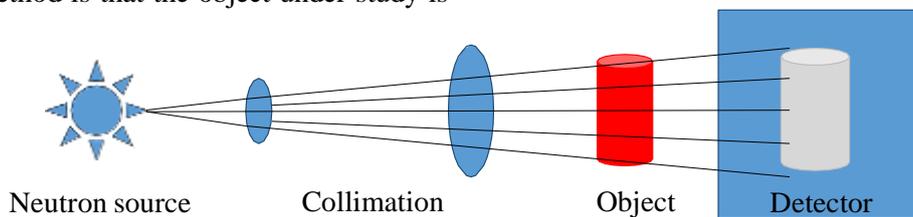


Figure 2 – Schematic diagram of the neutron radiography method

Neutron radiation passing through the material will weaken and is described by the formula (1) – the Beer–Lambert law [12].

$$I = I_0 e^{-\int_0^t N(x)\sigma(x)dx}. \quad (1)$$

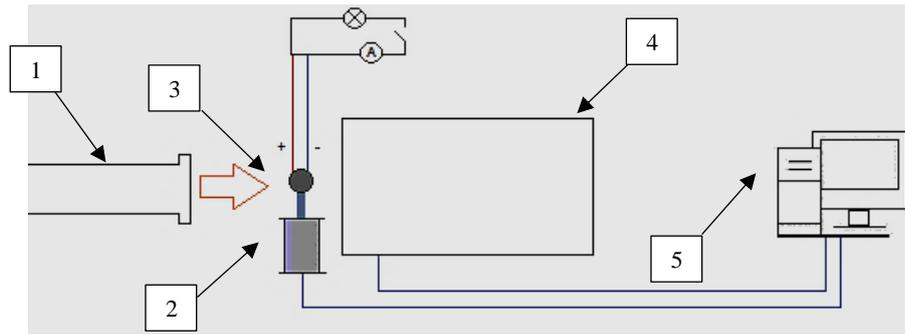
The degree of attenuation of radiation will depend on two processes - scattering and absorption. A radiation attenuation coefficient (μ) is introduced to quantify this value. Substituting this coefficient into the formula (1), the Beer–Lambert law is transformed into (2). This value describes the degree of penetration of the radiation into the material.

$$I = I_0 e^{-\mu x}. \quad (2)$$

During the experiments, the batteries were connected to a 0.068 W resistive load (see Fig. 3) and

were irradiated with a polychromatic neutron beam. During the tomographic images, the batteries rotated around the central axis. All neutron images were processed and analyzed in the ImageJ program [13]. In addition, due to the irregularity of the neutron beam, each type of sample in each experiment, images of an open beam (Open Beam) with an open gate (protective shutter) and a dark background with a closed gate (Dark Field) were taken. The dark background is eliminated by pixel-wise subtraction of the average dark background image without the neutron beam. The image was corrected according to formula (3) [14, 15].

$$P_n = -\log \left(\frac{I_{proj} - I_{dark\ field}}{I_{open\ beam} - I_{dark\ field}} \right). \quad (3)$$



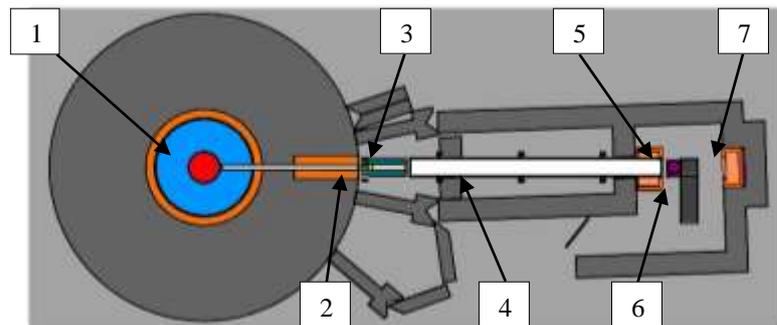
1 – neutron guide, 2 – goniometer, 3 – sample, 4 – detector system, 5 – PC.

Figure 3 – Electrical scheme of the experiment.

TITAN facility

Neutronographic experiments were carried out on the TITAN neutron radiography facility [16,20]. A schematic view of the facility is shown in

Figure 4. The facility is located on the first horizontal channel of the WWR-K research reactor [17-19]. The parameters of the TITAN facility that were used during the experiments are shown in Table 1.



1 – WWR-K reactor core, 2 –shutter, 3 – collimator and neutron beam filter, 4 – neutron guide, 5 – goniometer, 6 –detector system, 7 –beam stop.

Figure 4 – The layout of the main elements of TITAN facility (top of view).

Table 1 – TITAN setup parameters during experiments

Energy spectrum of neutrons	Maxwell spectrum (thermal neutrons)
Distance from the moderator to diaphragm	3.5 m
Distance from diaphragm to sample L	7 m
Hole diameter D	20 mm
L/D	350
Field of view	9*9 cm ²
Scintillation screen	⁶ LiF/ZnS: Ag –thickness 0.1 mm
Camera CCD	HAMAMATSU-S12101 2048*2048 pixels, size 12*12 μm Full size 24x24 mm
Thermal neutron flux per sample	1.2*10 ⁷ n/cm ² /sec at L/D=350
Neutron filter	Sapphire (thickness - 106 mm)
Standard exposure time	20 sec

The neutron beam of the facility is formed using a simple collimator system, which consists of several boron-contained polyethylene and cadmium disks with different collimator pinholes with variable aperture diameters D from 5 to 90 mm. To increase the characteristic parameter L/D , a neutron guide was installed behind the protective shutter. This allow to increase aperture-detector distance L and total distance is 7 m. The characteristic parameter L/D can be changed from 75 to 1400. To suppress background gamma and fast neutron radiation, a cylindrical single-crystal sapphire filter, with thickness 106 mm and diameter 110 mm, is mounted in the collimator system. Environment in neutron guide is vacuum which necessary to reduce neutron beam losses due to an air scattering. Maximum thermal neutron flux at the sample position is $10^8 \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$.

Results and discussion

The lithium ion dynamics were controlled until the batteries were completely discharged. Three-dimensional neutron images of the studied batteries in charged and discharged states are shown in Figures 5 and 6. The figures visually show the migration of lithium ions from the negatively charged electrode (anode) to the positively charged electrode (cathode) as the batteries are discharged. According to [5, 6], three pathways for the migration of lithium ions in batteries are possible: (1) pathway, along the direction; (2) pathway, a zigzag trajectory in the crystal plane; (3) pathway, in the crystal plane. Each path has its own migration barrier energy. The migration of lithium ions in a battery is a complex process and cannot be described by Fick's second law.

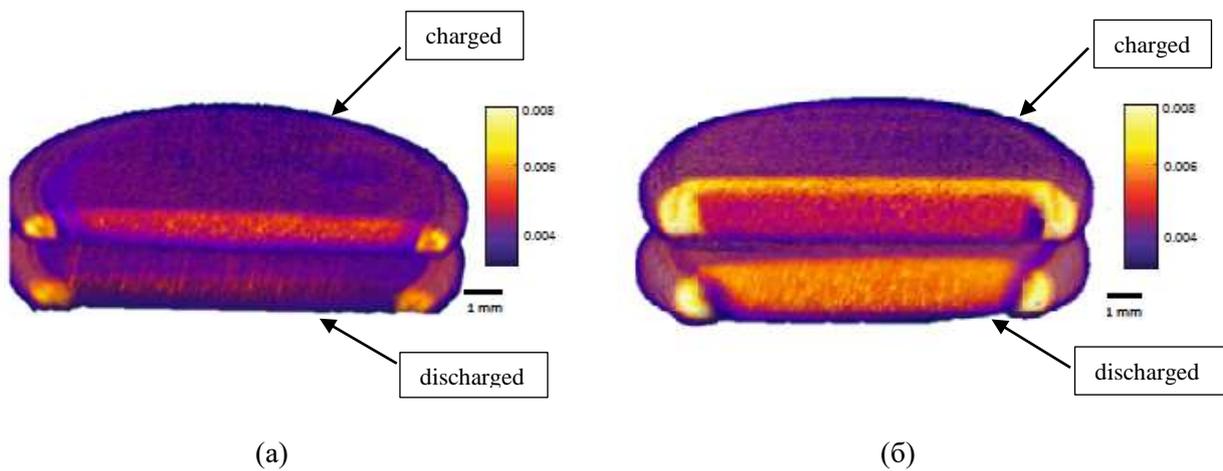


Figure 5 – Three-dimensional image of the battery: (a) CR2016; (b) CR2032

Figure 6 shows the distributions of the linear attenuation coefficient of neutron radiation over the thickness of the batteries during their discharge. The graphs show that in the CR2016 battery the peak of the neutron attenuation coefficient during discharge, and therefore the maximum concentration of lithium, has moved 0.3 mm closer to the cathode (Fig. 6(a)). In a CR2032 battery, the migration of lithium ions across the battery, from anode to cathode, and the saturation with lithium of the area close to the cathode is clearly demonstrated (Fig.6(b)).

The migration rate of lithium ions was: for CR2016 – $0.83 \times 10^{-5} \text{ cm/s}$; for CR2032 - $0.36 \times 10^{-4} \text{ cm/s}$.

It should be noted that the behavior of lithium ions in the studied batteries is different. In the CR2032 battery, lithium ions, during discharge, were distributed almost evenly over the entire thickness. Whereas in CR2016 batteries, lithium ions were moved to the area of the separator with the electrolyte.

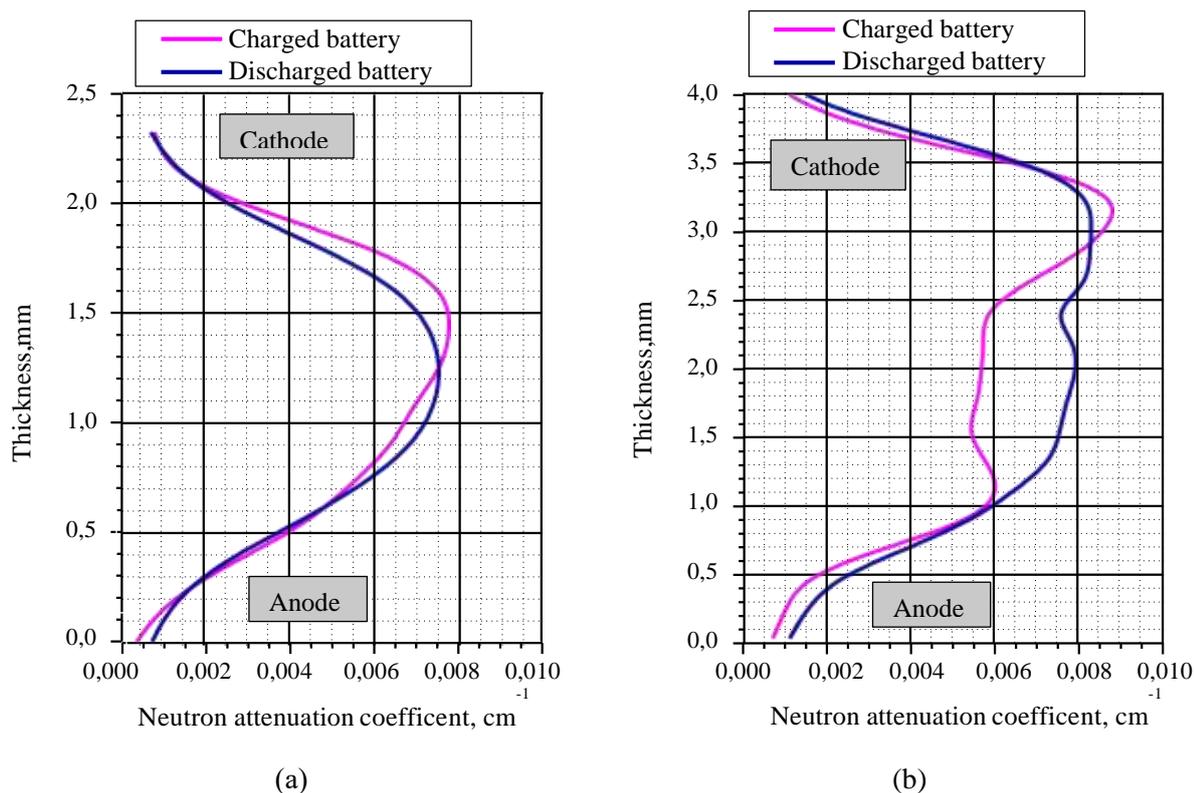


Figure 6 – Distribution of neutron attenuation coefficient by battery thickness: (a) CR2016; (b) CR2032

Conclusions

In this work, two types of commercial lithium-ion batteries CR2016 and CR2032 were investigated by neutron radiography. These batteries have different electrophysical characteristics. Experimental studies were carried out in real time with the connection of a resistive load to the batteries.

As a result of this research, the migration of lithium ions and their distribution in the battery

during discharge was studied. It is shown that lithium ions migrate from the anode to the cathode. The lithium ion migration velocity was: for CR2016 $0.83 \cdot 10^{-5}$ cm/s, for CR2032 $0.36 \cdot 10^{-4}$ cm/s. The results obtained help to understand the migration of lithium ions in the batteries under consideration. Three-dimensional tomography of batteries also showed intuitive images of the migration of lithium ions in batteries during their discharge.

References

- 1 Yang Z., Gu L., Hu Y.S., & Li H. Atomic-scale structure-property relationships in lithium ion battery electrode materials //Annual Review of Materials Research. – 2017. – Vol.47. – P.175-198.
- 2 <https://atom.kaeri.re.kr/> – Nuclear database.
- 3 Wu Musheng, Xu Bo, Ouyang Chuying. Physics of electron and lithium-ion transport in electrode materials for Li-ion batteries //Chinese Physics B. – 2016. – Vol. 25(1). – Art.No 018206.
- 4 Siegel J.B. et al. Neutron Imaging of Lithium Concentration in LFP Pouch Cell Battery //J. Electrochem. Soc. – 2011. – Vol.158. – P.A523-A528.
- 5 Butler L.G., Lehmann E.H., Schillinger B. Neutron radiography, tomography, and diffraction of commercial lithium-ion polymer batteries //Physics Procedia. – 2013. – Vol.43. – P.331 – 336.
- 6 Jia M., Wang H., Sun Z., Chen Y., Guo C. and Gan L. Exploring ion migration in Li₂MnSiO₄ for Li-ion batteries through strain effects //RSC Adv. – 2017. – Vol.7. – P.26089–26096.
- 7 Luo Y., Shui M., Shu J. Understanding the lithium transport mechanism in monoclinic Li₃V₂(PO₄)₃ cathode material by atomistic simulation //Results in Physics. – 2019. – Vol.14. – Art.No 102490.
- 8 Yang F. Field-Limited Migration of Li-Ions in Li-Ion Battery //ECS Electrochemistry Letters. – 2015. – Vol.4 (1). – P.A7-A9.
- 9 Kordatos A., Kuganathan N., Kelaidis N., Iyngaran P., Chroneos A. Defects and lithium migration in Li₂CuO₂ //Scientific reports. – 2018. – Vol.8. – P.6754.

- 10 Choo Y., Halat D.M., Villaluenga I., Timachova K., Balsara N.P. Diffusion and migration in polymer electrolytes //Progress in Polymer Science. – 2020. – Vol.103. – P.101220.
- 11 Lee Y.S., Ryu K.S. Study of the lithium diffusion properties and high rate performance of TiNb₆O₁₇ as an anode in lithium secondary battery //Sci Rep. – 2017. – Vol.7. – P.16617.
- 12 Raventosa M., Hartia R.P, Lehmann E. and Grünzwei C. A method for neutron scattering quantification and correction applied to neutron imaging //Physics Procedia. – 2017. – Vol.88. P.275-281.
- 13 Collins T.J. ImageJ for microscopy // Biotechniques. – 2007. – Vol.43. – P.25-30.
- 14 Carminati C., Boillat P., Schmid F., Vontobel P., Hovind J., Morgano M., Raventos M., Siegwart M., Mannes D., Gruenzweig C., Trtik P., Lehmann E., Strobl M., Kaestner A. Implementation and assessment of the black body bias correction in quantitative neutron imaging. //PLoS ONE. – 2019. – Vol. 14(1). – e0210300.
- 15 Abd el Bar W., Imbaby I. Mahmoud, Hussein A. Konber, T. Mongy Image reconstruction technique using projection data from neutron tomography system // Alexandria Engineering Journal. – 2015. – Vol.54. – P.1057-1066.
- 16 Nazarov K.M., Muhametuly B., Kenzhin E.A., Kichanov S.E., Kozlenko D.P., Lukin E.V., Shaimerdenov A.A. New neutron radiography and tomography facility TITAN at the WWR-K reactor //Nuclear Inst. and Methods in Physics Research A. – 2020. – Vol.982. – P.164572.
- 17 Аринкин Ф.М., Шаймерденов А.А., Гизатулин Ш.Х., Дюсамбаев Д.С., Колточник С.Н., Чакров П.В., Чекушина Л.В. Конверсия активной зоны исследовательского реактора ВВР-К // Атомная энергия. – 2017. – 1 (123). – С. 15-20.
- 18 Shaimerdenov A.A., Nakipov D.A., Arinkin F.M., Gizatulin Sh.Kh., Chakrov P.V., and Kenzhin Ye.A. The 50th Anniversary of the WWR-K Research Reactor // Physics of Atomic Nuclei. – 2018. – Vol. 81, No. 10. – P.1408–1411.
- 19 Bauyrzhan A.B., Koltchnik S.N., Aitkulov M.T., Dyussambayev D.S., Shaimerdenov A.A., Mukhametuly B., Burtebaev N.T. Neutron-physical parameters at the outlet of the WWR-K reactor beam tube. //Eurasian Journal of Physics and Functional Materials. – 2019. – Vol.3(3). – P.219-225.
- 20 Nazarov K.M., Kichanov S.E., Lukin E.V., Zel I.Yu., Kozlenko D.P., Zholdybayev T.K., Muhametuly B., Kenessarin M., Rutkauskas A.V., Yskakov A., Belova M.O. A comparative study of promising filter materials for neutron imaging facilities //Eurasian Journal of Physics and Functional Materials. – 2021. – Vol.5(4). – P.169-180.

References

- 1 Z. Yang, L. Gu, Y.S. Hu, & H. Li Annual, Review of Materials Research, 47, 175-198 (2017).
- 2 <https://atom.kaeri.re.kr/> link to Nuclear database
- 3 Wu Musheng, Xu Bo, Ouyang Chuying, Chinese Physics B, 25(1), 018206 (2016).
- 4 J.B. Siegel et al., J. Electrochem. Soc. 158, A523-A528 (2011).
- 5 L.G. Butler, E.H. Lehmann, B. Schillinger, Physics Procedia, 43, 331–336 (2013).
- 6 M. Jia, H. Wang, Z. Sun, Y. Chen, C. Guo and L. Gan, RSC Adv.,7, 26089-26096 (2017).
- 7 Y. Luo, M. Shui, J. Shu, Results in Physics 14, 102490 (2019).
- 8 F. Yang, ECS Electrochemistry Letters, 4 (1), A7-A9 (2015).
- 9 A. Kordatos, N. Kuganathan, N. Kelaidis, et al., Scientific reports, 8, 6754 (2018).
- 10 Y. Choo, D.M. Halat, et.al., Progress in Polymer Science, 103, 101220 (2020).
- 11 Y.S. Lee, K.S. Ryu, Scientific reports, 7, 16617 (2017).
- 12 M. Raventosa, R.P. Hartia, E. Lehmann and C. Grünzwei, Physics Procedia, 88, 275-281, (2017).
- 13 T.J.Collins, Biotechniques, 43, 25-30 (2007).
- 14 C. Carminati, P. Boillat, F. Schmid, P. Vontobel, J. Hovind, M. Morgano, et al, PLoS ONE 14(1). e0210300 (2019).
- 15 Waleed Abd el Bar, Imbaby I. Mahmoud, Hussein A. Konber, T. Mongy, Alexandria Engineering Journal, 54, 1057-1066 (2015).
- 16 K.M. Nazarov, B. Muhametuly, E.A. Kenzhin, S.E. Kichanov, D.P. Kozlenko, E.V. Lukin, A.A. Shaimerdenov, Nuclear Inst. and Methods in Physics Research, 982, 164572 (2020).
- 17 Arinkin F.M., Shaimerdenov A.A., Gizatulin Sh.Kh., Dyusambaev D.S., Koltchnik S.N., Chakrov P.V., Chekushina L.V., Atomnaya energiya, 1 (123), 5-20 (2017). (in Russ)
- 18 A.B. Bauyrzhan, S.N. Koltchnik, M.T. Aitkulov, D.S. Dyussambayev, A.A. Shaimerdenov, B. Mukhametuly, N.T. Burtebaev, Eurasian Journal of Physics and Functional Materials, 3(3), 219-225 (2019).
- 19 K.M. Nazarov, S.E. Kichanov, et.al., Eurasian Journal of Physics and Functional Materials, 5(4), 169-180 (2021).
- 20 K.M. Nazarov, S.E. Kichanov, et.al., Eurasian Journal of Physics and Functional Materials, 5(4), 169-180 (2021).

IRSTI 29.19

<https://doi.org/10.26577/RCPH.2022.v81.i2.011>

A. Houbi^{1*}, Y. Atassi², A.A. Zharmenov¹, Zh.T. Bagasharova¹,
S.K. Myrzaliev¹, K.B. Kadyrakunov³, B.A. Karibayev⁴

¹The Institute of Complex Processing of Mineral Raw Materials, Kazakhstan, Almaty

²The Institute Higher Institute for Applied Sciences and Technology, Syria, Damascus

³Engineering Technological University, Kazakhstan, Almaty

⁴Al-Farabi Kazakh National University, Kazakhstan, Almaty

*email: Anashoubi@gmail.com

MICROWAVE ABSORPTION AND ELECTROMAGNETIC INTERFERENCE SHIELDING PROPERTIES OF CARBON BLACK/MnNiZn FERRITE NANOCOMPOSITES-FILLED PARAFFIN WAX IN THE FREQUENCY RANGE (8.8–12 GHz)

In this present work, we offer the design of good, wideband microwave absorption materials (MAMs) based on CB/Mn_{0.1}Ni_{0.5}Zn_{0.4}Fe₂O₄ (carbon black/MnNiZn ferrite). The ferrite is prepared by a self-combustion method using sucrose as fuel. The chemical is utilized for the synthesis of carbon black nanopowder is carbon black powder (2–8 μm). Then, the operation is continued via mixing carbon black and MnNiZn ferrite through the grinding balls. Four various weight ratios of CB/Mn_{0.1}Ni_{0.5}Zn_{0.4}Fe₂O₄ (1:0, 1:1, 2:1, and 3:1) with various thicknesses (2–4–6 mm) are prepared. X-ray diffractometry and FTIR spectroscopy are utilized in order to characterize samples. The morphology of the powders is investigated by SEM. The electromagnetic interference (EMI) shielding and microwave absorption properties are measured in the frequency band of 8.8–12 GHz to accomplish the practical characterization. The MAMs show broad bandwidths under -10 dB in the range of 0.3–3.2 GHz and reasonable surface density in the range of 2.91–3.66 kg/m² with a weight ratio within a paraffin matrix of 40% w/w. The MAM shows a minimal reflection loss of -18.3 dB at the frequency of 11.4 GHz for the thickness of 2 mm. The maximum shielding efficiency is 18.5 dB at 11.5 GHz for 2 mm thickness of the CB/F-21 nanocomposite sample.

Key words: MnNiZn ferrite, carbon black, Absorption bandwidth, Reflection loss, Shielding efficiency.

А. Хуби^{1*}, И. Атасси², А.А. Жарменов¹, Ж. Т. Багашарова¹,
С.К. Мырзалиева¹, К.Б. Кадыракунов³, Б.А. Карибаев⁴

¹Институт комплексной переработки минерального сырья, Казахстан, г. Алматы

²Высший институт прикладных наук и технологий, Сирия, г.Дамаск

³Казахстанский инженерно-технологический университет, Казахстан, г. Алматы

⁴Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Казахстан, г. Алматы

*e-mail: Anashoubi@gmail.com

Свойства поглощения микроволн и экранирования электромагнитных помех нанокompозитов черного углерода/феррит MnNiZn с парафиновым наполнителем в диапазоне 8,8–12 ГГц

В данной работе нами предложена разработка материалов с широкополосным поглощением микроволнового излучения на основе СВ/Мn_{0.1}Ni_{0.5}Zn_{0.4}Fe₂O₄ (черный углерод/феррит MnNiZn). Ферриты получены методом самовозгорания с использованием сахарозы в качестве топлива. Химикат используется для синтеза нанопорошка, представляющего собой порошок сажи (2–8 мкм). Затем операцию продолжают путем перемешивания сажи и феррита MnNiZn через мелющие шары. Готовят четыре различных весовых соотношения СВ/Мn_{0.1}Ni_{0.5}Zn_{0.4}Fe₂O₄ (1:0, 1:1, 2:1 и 3:1) различной толщины (2, 4, 6 мм). Рентгеновская дифрактометрия и FTIR-спектроскопия используются для определения характеристик образцов. Морфологию порошков исследуют с помощью СЭМ. Экранирование электромагнитных помех (ЭМП) и свойства поглощения микроволн измеряются в полосе частот 8,8–12 ГГц для получения практических

характеристик. Материалы, поглощающие микроволновое излучение, имеют широкую полосу пропускания ниже -10 дБ в диапазоне 0,3–3,2 ГГц и приемлемую поверхностную плотность в диапазоне 2,91–3,66 кг/м² при весовом соотношении в парафиновой матрице 40% по весу. Материал, поглощающий микроволновое излучение, при толщине 2 мм демонстрирует минимальное значение обратной потери (-18,3 дБ) на частоте 11,4 ГГц. Максимальная эффективность экранирования составляет 18,5 дБ на частоте 11,5 ГГц для образца нанокompозита СВ/F-21 толщиной 2 мм.

Ключевые слова: Феррит MnNiZn, черный углерод, полоса поглощения, обратные потери, эффективность экранирования.

А. Хуби^{1*}, И. Атасси², А.А. Жарменов¹, Ж. Т. Бағашарова¹,
С.К. Мырзалиева¹, К.Б. Қадырақунов³, Б.А. Кәрібаев⁴

¹Минералды шикізатты кешенді өңдеу институты, Қазақстан, Алматы қ.

²Қолданбалы ғылымдар және технологиялар жоғары институты, Сирия, Дамаск қ.

³Қазақстан инженерлік-технологиялық университеті, Қазақстан, Алматы қ.

⁴Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Қазақстан, Алматы қ.

*e-mail: Anashoubi@gmail.com

Парафинмен толтырылған қара көміртекті/MnNiZn ферритті нанокompозиттердің 8,8-12 ГГц диапазонындағы микротолқынды жұтылу және электромагниттік экрандау қасиеттері

Бұл жұмыста СВ/Mn_{0.1}Ni_{0.5}Zn_{0.4}Fe₂O₄ (қара көміртек /MnNiZn ферриті) негізіндегі кең жолақты микротолқынды сіңіру материалдарының жасалынуы ұсынылған. Ферриттер сахарозаны отын ретінде қолдану арқылы өздігінен жану арқылы алынады. Химиялық зат көміртекті қара ұнтақ (2–8 мкм) болып табылатын наноұнтақ синтезі үшін қолданылады. Операция содан кейін ұнтақтау шарлары арқылы қара көміртекті және MnNiZn ферритін араластыру арқылы жалғасады. Әртүрлі қалыңдықтағы (2, 4, 6 мм) СВ/Mn_{0.1}Ni_{0.5}Zn_{0.4}Fe₂O₄ (1:0, 1:1, 2:1 және 3:1) төрт түрлі салмақ қатынасы дайындалады. Үлгілерді сипаттау үшін рентгендік дифракция және FTIR спектроскопиясы қолданылады. Ұнтақтардың морфологиясы SEM көмегімен зерттеледі. Практикалық сипаттамаларды алу үшін электромагниттік кедергілерді (EMI) қорғау және микротолқынды жұту қасиеттері 8,8-12 ГГц жиілік диапазонында өлшенді. Микротолқынды жұтатын материалдар 0,3-3,2 ГГц диапазонында -10 дБ-ден төмен кең өткізу қабілеттілігіне және салмағы бойынша 40% парафиндік матрицадағы салмақ қатынасында 2,91-3,66 кг/м² диапазонында қолайлы аумақтық тығыздыққа ие. Микротолқынды жұтатын материал қалыңдығы 2 мм болатын 11,4 ГГц жиілікте -18,3 дБ кері шағылуын көрсетеді. Қалыңдығы 2 мм СВ/F-21 нанокompозиттік үлгісі үшін экрандаудың максималды тиімділігі 11,5 ГГц жиілікте 18,5 дБ-ді құрайды.

Түйін сөздер: MnNiZn ферриті, қара көміртегі, сіңіру жолағы, кері шағылу, экрандау тиімділігі.

Introduction

The current development of electronics and intelligent devices wide the world has generated electromagnetic interference (EMI), which is currently becoming a critical problem in the microwave frequency bands [1–6]. Repression of EMI and EM radiation plays an essential part in beating this critical problem. Materials that can reduce EMI draw a lot of notice due to their important part in blocking undesirable EMI. Presently, several dielectric loss materials such as conductive polymers and carbon materials or magnetic loss materials such as metal

oxides have played an essential role in elevated-frequency EM wave absorption. Nevertheless, the defects involving elevated density, low reflection absorption, and narrow wideband have hugely limited conventional loss materials' workable benefits for EM wave absorption [7–10]. Recently, MA composites based on carbon and ferrite, have obtained significant concern due to their excellent electrical and ferrimagnetic characteristics. Carbonaceous materials-based composites have pulled in major attention for microwave absorption lately such as carbon nanotubes, carbon fibers, graphene and carbon black because of the unique structure of carbon-based

materials. More precisely, carbon black is usually used to fit the requirements of high-effective microwave attenuation materials because of its superior characteristics, for example, high permittivity, high specified surface region, unique electronic conductivity, huge interface, etc. [11,12]. Carbon black has a unique place in the range of elevated-frequency MAMs. Furthermore, spinel ferrites have excellent MA characteristics due to their unique magnetic characteristics. MnNiZn ferrites are considered suitable materials for high-frequency implementations [13,14]. When MnNiZn ferrite is blended with CB, the MA characteristics of the resultant composite are anticipated to enhance. According to this, CB/Zn_{0.8}Ni_{0.2}Fe₂O₄ nanoparticles scattered in a SiO₂ matrix were successfully synthesized by Anh et al. [15]. The effects of Zn_{0.8}Ni_{0.2}Fe₂O₄ nanoparticles range (0–1.75 wt%) and various coating thicknesses (1–2.5 mm) on MA performance in the X-band frequency have been investigated. The outcomes indicated that a specimen of 1.5 wt% Zn_{0.8}Ni_{0.2}Fe₂O₄ nanoparticles content showed the highest MA at 10 GHz frequency. Higher

Methods and materials

Synthesis of ferrite (Mn_{0.1}Ni_{0.5}Zn_{0.4}Fe₂O₄) nanoparticles

Ferrite (Mn_{0.1}Ni_{0.5}Zn_{0.4}Fe₂O₄) nanoparticles were prepared by a self-combustion method. Mn_{0.1}Ni_{0.5}Zn_{0.4}Fe₂O₄ were synthesized by taking appropriate amounts of nickel (II) nitrate hexahydrate (Ni(NO₃)₂·6H₂O), zinc nitrate hexahydrate (Zn(NO₃)₂·6H₂O), iron(III) nitrate nonahydrate (Fe(NO₃)₃·9H₂O) and manganese(II) chloride tetrahydrate (MnCl₂·4H₂O) were blended together with an aqueous solution of sucrose (2 moles per metal ion) and 2% an aqueous solution of polyvinyl alcohol (PVA). The whole mixture was blended totally and heated at 90 °C for 7 h to shape a viscous liquid. The heating process was accompanied by the evolution of brown fumes of NO₂ from the decomposed metal nitrate salts. After that, the mixture was transferred to dry for 2 h at 200 °C in the furnace to obtain a fluffy carbonaceous pyrolyzed mass. After that, the resulting mass was annealed at 750 °C for 4 h to obtain nanoparticles of ferrite.

Preparation of carbon black nanopowder

The average particle size of as-extruded carbon black powder was measured utilizing the sieve shaker

coating thicknesses (1–2.5 mm) showed bigger MA and arrived at a so high absorption of 2 mm thickness. On the other hand, Akhtar et al. [16] designed strontium ferrite epoxy (SrF) nanocomposite and CB-loaded CBSrF nanocomposite. The minimum reflection loss (RL_{min}) for the SrF nanocomposite is -25.19 dB at 13.32 GHz for 10.5 mm thickness, whereas for CBSrF nanocomposite the RL_{min} is -31.15 dB at 10.32 GHz for 9.5 mm thickness. Therefore, the CB-loaded SrF nanocomposite exhibits higher attenuation effectiveness than the SrF nanocomposite. In the present work, we study the effect of different weight ratios of CB/Mn_{0.1}Ni_{0.5}Zn_{0.4}Fe₂O₄ and its effect on EMI shielding and MA properties. The aim of the study is to prepare MAMs that have high shielding effectiveness and wideband absorbers with a weight ratio within a paraffin matrix of 40% w/w and bandwidth that covers almost the whole frequency band (8.8–12 GHz). The experimental operation consists of synthesizing the ferrite by a self-combustion method. After that, the operation is continuous by mixing and grinding CB and MnNiZn ferrite by the grinding balls.

and it was between 2–8 μm. Carbon black nanopowder has been created via the grinding balls. The as-extruded carbon black powder was milled for 12 h at 300 rpm.

Preparation of CB/Mn_{0.1}Ni_{0.5}Zn_{0.4}Fe₂O₄ nanocomposites

CB nanopowder and ferrite nanoparticles were mixed and milled by the grinding balls. Four various weight ratios of CB/Mn_{0.1}Ni_{0.5}Zn_{0.4}Fe₂O₄ (1:0, 1:1, 2:1, and 3:1) were prepared. The CB/Mn_{0.1}Ni_{0.5}Zn_{0.4}Fe₂O₄ nanocomposites were ball-milled for 1 h at 300 rpm. Table 1 shows the symbols of nanocomposite samples.

Synthesis of samples for measuring the MA and EMI shielding properties

Paraffin wax was symmetrically blended with CB/Mn_{0.1}Ni_{0.5}Zn_{0.4}Fe₂O₄ nanocomposites powders with a weight ratio of nanocomposites within a paraffin matrix of 40% w/w by heating and stirring for 15 min. Thereafter, the absorption samples with various thicknesses (2–4–6 mm) were molded to measure RL and shielding efficiency (SE) in the frequency band (8.8–12 GHz).

Results and discussion

XRD patterns

The crystalline structures of the nanopowders are defined by XRD. The XRD patterns of $\text{Mn}_{0.1}\text{Ni}_{0.5}\text{Zn}_{0.4}\text{Fe}_2\text{O}_4$ and CB nanopowders are shown in Figure 1. For the $\text{Mn}_{0.1}\text{Ni}_{0.5}\text{Zn}_{0.4}\text{Fe}_2\text{O}_4$ pattern, six diffraction peaks are noticed, which conform to (hkl)

planes of (220), (311), (400), (422), (511) and (440), respectively. The ideal spinel structure is noticed by the peaks of MnNiZn ferrite [17]. The XRD pattern of $\text{Mn}_{0.1}\text{Ni}_{0.5}\text{Zn}_{0.4}\text{Fe}_2\text{O}_4$ is totally matched with the reference XRD patterns (JCPDS, PDF no. 08-0234). On the other hand, for the CB pattern, two diffraction peaks are noticed, which conform to (hkl) planes of (002) and (100), respectively [18].

Table 1 – Symbols of nanocomposite samples.

Sample symbols	Weight ratio	
	Carbon black	$\text{Mn}_{0.1}\text{Ni}_{0.5}\text{Zn}_{0.4}\text{Fe}_2\text{O}_4$
CB/F-10	1	0
CB/F-11	1	1
CB/F-21	2	1
CB/F-31	3	1

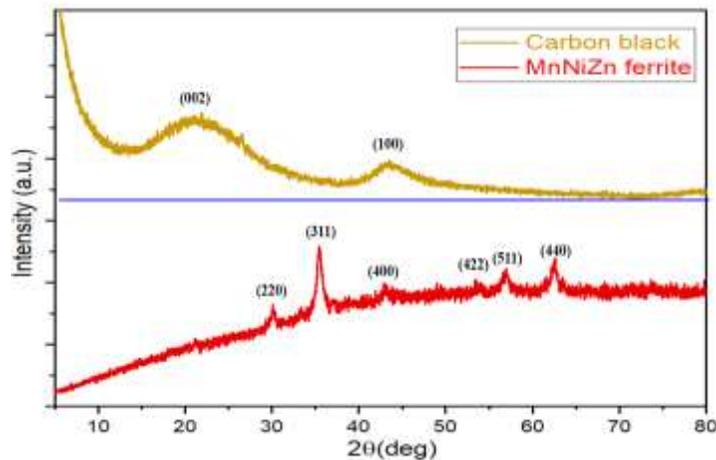


Figure 1 - XRD patterns of MnNiZn ferrite and carbon black.

FTIR spectra

Figure 2 shows the FTIR spectra of the $\text{Mn}_{0.1}\text{Ni}_{0.5}\text{Zn}_{0.4}\text{Fe}_2\text{O}_4$ nanoparticles and CB nanopowder. For the $\text{Mn}_{0.1}\text{Ni}_{0.5}\text{Zn}_{0.4}\text{Fe}_2\text{O}_4$ nanoparticles, two peaks at 571.6 cm^{-1} and 446.3 cm^{-1} are referring to the stretching vibration of (Fe-O), which emphasizes the forming of the metal-oxygen in ferrite-based [19]. On the other hand, the peak at 1630.4 cm^{-1} in $\text{Mn}_{0.1}\text{Ni}_{0.5}\text{Zn}_{0.4}\text{Fe}_2\text{O}_4$ and CB is referring to C=O stretching vibration, and the peaks at 2348 cm^{-1} and 3452 cm^{-1} are referring to O-H stretching vibration [20,21].

SEM analysis

The morphology of the MnNiZn ferrite and CB is verified by SEM, which is illustrated in Figure 3. In

Figure 3 (a), one can notice the agglomerated spherical particles of MnNiZn ferrite. The average diameters of the spherical-shaped particles are observed to be ranging between 21–59 nm. On the other hand, the average particle size of CB nanopowder (Figure 3 (b)) is noticed to be ranging between 75–481 nm.

EMI shielding and MA properties

There are two general methods that cope with the interference of incident electromagnetic waves: the first one is electromagnetic interference (EMI) shielding and the second one is microwave absorption (MA). For the EMI shielding method (Figure 4a), the significant point is to attenuate the transmitted power of the EM waves (p_T). On the other hand, for the

microwave absorption method (Figure 4b), though, a metal plate is put to reflect the transmitted power of the EM waves. As a consequence, the transmitted power of the EM waves is negligible in microwave absorption. EMI shielding and MA properties of the prepared samples are estimated with the free-space technique. EM waves are generated by a microwave generator in the frequency band of 8.8–12 GHz (with wavelengths $\lambda = 2.5\text{--}3.4$ cm), where a microwave generator is connected by a WR90 waveguide instrument (IEC Standard R100, X Band). The incident EM waves (p_{in}) are measured by the horn antenna connected to an oscilloscope, then the prepared sample perpendicularly is placed between a

microwave generator and the horn antenna to measure the transmitted power of the EM waves (p_T) by an oscilloscope. As a result, SE can be calculated for the EMI shielding by applying the equation (1) [22]:

$$SE (dB) = SE_R + SE_A + SE_M = 10 \log \frac{p_{in}}{p_T}. \quad (1)$$

It is significant to note that the multiple reflection loss (SE_M) can be ignored if the absorption shielding (SE_A) of EMI shielding material is higher than 10 dB and equation (1) then can be rewritten as [22]:

$$SE (dB) = SE_R + SE_A = 10 \log \frac{p_{in}}{p_T}. \quad (2)$$

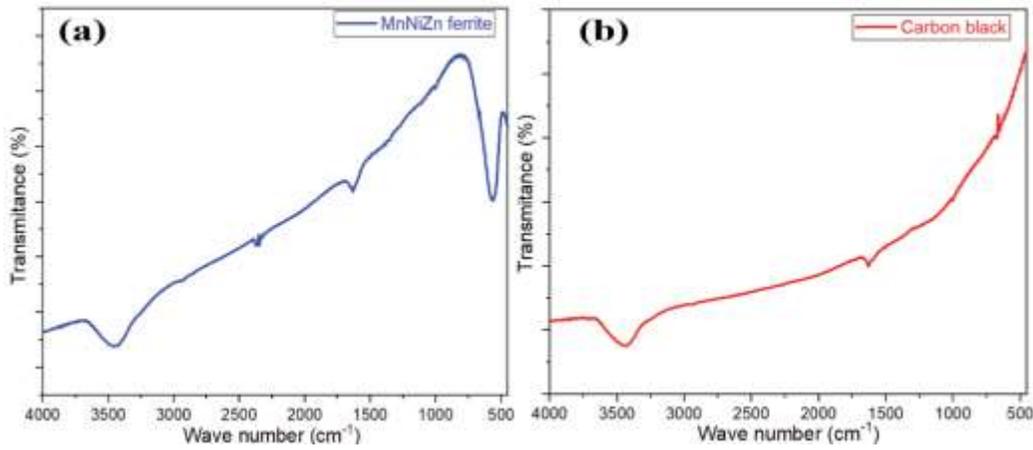


Figure 2 - FTIR spectra of (a) MnNiZn ferrite and (b) carbon black.

In addition to that, the reflected power of the EM waves (p_{ref}) is measured when the EM waves are incident on the sample surface at an angle of 45° by an oscilloscope. As a result, the shielding by reflection (SE_R) can be calculated for the EMI shielding by applying the equation (3).

$$\begin{aligned} SE_R (dB) &= -10 \log(1 - R) = \\ &= -10 \log \left(1 - \frac{p_{ref}}{p_{in}} \right). \end{aligned} \quad (3)$$

Finally, the shielding by absorption (SE_A) is calculated by equation (4) [23,24]:

$$\begin{aligned} SE_A (dB) &= -10 \log \left(\frac{T}{1 - R} \right) = \\ &= -10 \log \left(\frac{p_T}{p_{in} - p_{ref}} \right). \end{aligned} \quad (4)$$

Figure 5 represents the shielding efficiency (SE) of CB/Mn_{0.1}Ni_{0.5}Zn_{0.4}Fe₂O₄ nanocomposites in the frequency band (8.8–12 GHz) with various thicknesses (2–6 mm). The results illustrate that the maximum shielding efficiency is 18.5 dB at the frequency of 11.5 GHz for the thickness of 2 mm of the CB/F-21 nanocomposite sample. Figure 6 shows the SE_R and SE_A of CB/Mn_{0.1}Ni_{0.5}Zn_{0.4}Fe₂O₄ nanocomposites with various thicknesses (2–6 mm) at the frequency of 11.5 GHz. For the microwave absorption method, the prepared sample is placed on the metal plate at an angle of 45° to measure the reflected power of the EM waves (p_{ref}) by an oscilloscope. As a result, RL can be calculated by applying the equation (5) [23,24]:

$$Rl (dB) = 10 \log \frac{p_{in}}{p_{ref}}. \quad (5)$$

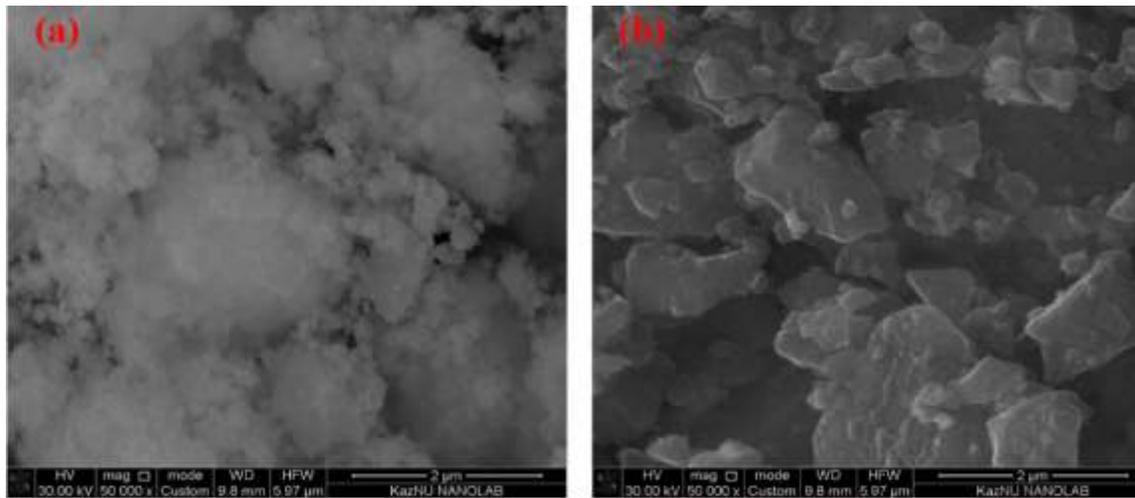


Figure 3 - SEM images of (a) MnNiZn ferrite and (b) carbon black

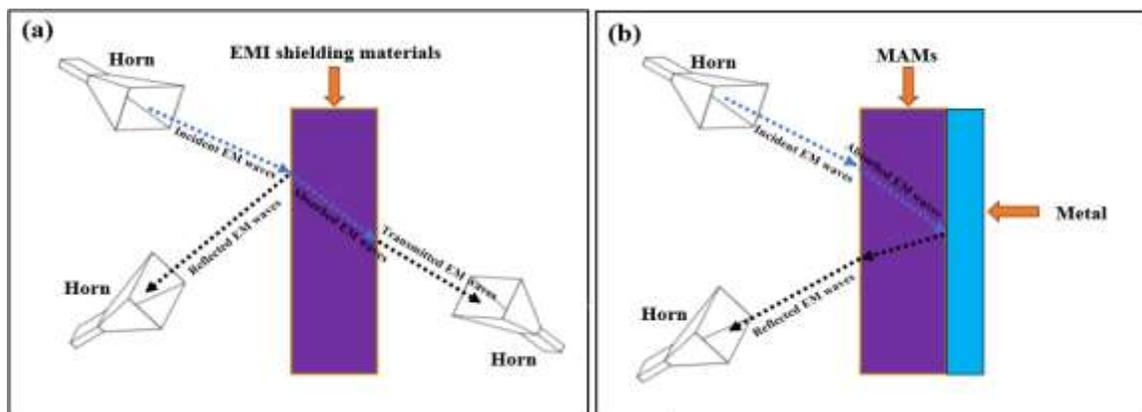


Figure 4 - Sketch of the estimate models of (a) electromagnetic interference shielding and (b) microwave absorption.

Figure 7 illustrates the RL of CB/Mn_{0.1}Ni_{0.5}Zn_{0.4}Fe₂O₄ nanocomposites with various thicknesses (2–4–6 mm) at the weight percentage of the absorber within a paraffin matrix (40% w/w). Figure 7 illustrates that the RL attenuation peaks of samples moved to lower frequencies with increasing sample thickness. This phenomenon may be defined by the quarter-wavelength ($\lambda/4$) cancellation model, as shown in equation (6) [25–27]:

$$t_m = \frac{c}{4t f_m \sqrt{|\mu_r| |\varepsilon_r|}} \quad (6)$$

Where $|\varepsilon_r|$ and $|\mu_r|$ are the modulus of the measured complex relative permittivity (ε_r) and permeability (μ_r) at matching frequency (f_m), respectively. c is the velocity of light.

Table 2 shows the low surface density (SD) of all the prepared absorbers. As a result, one can notice the impact of incorporating Mn_{0.1}Ni_{0.5}Zn_{0.4}Fe₂O₄ (magnetic loss material) and CB (dielectric loss material) on the EMI and MA properties of the prepared absorber. This incorporation drives to an effective and low thickness absorber with a wide bandwidths under -10 dB (BW_{-10dB}) [28].

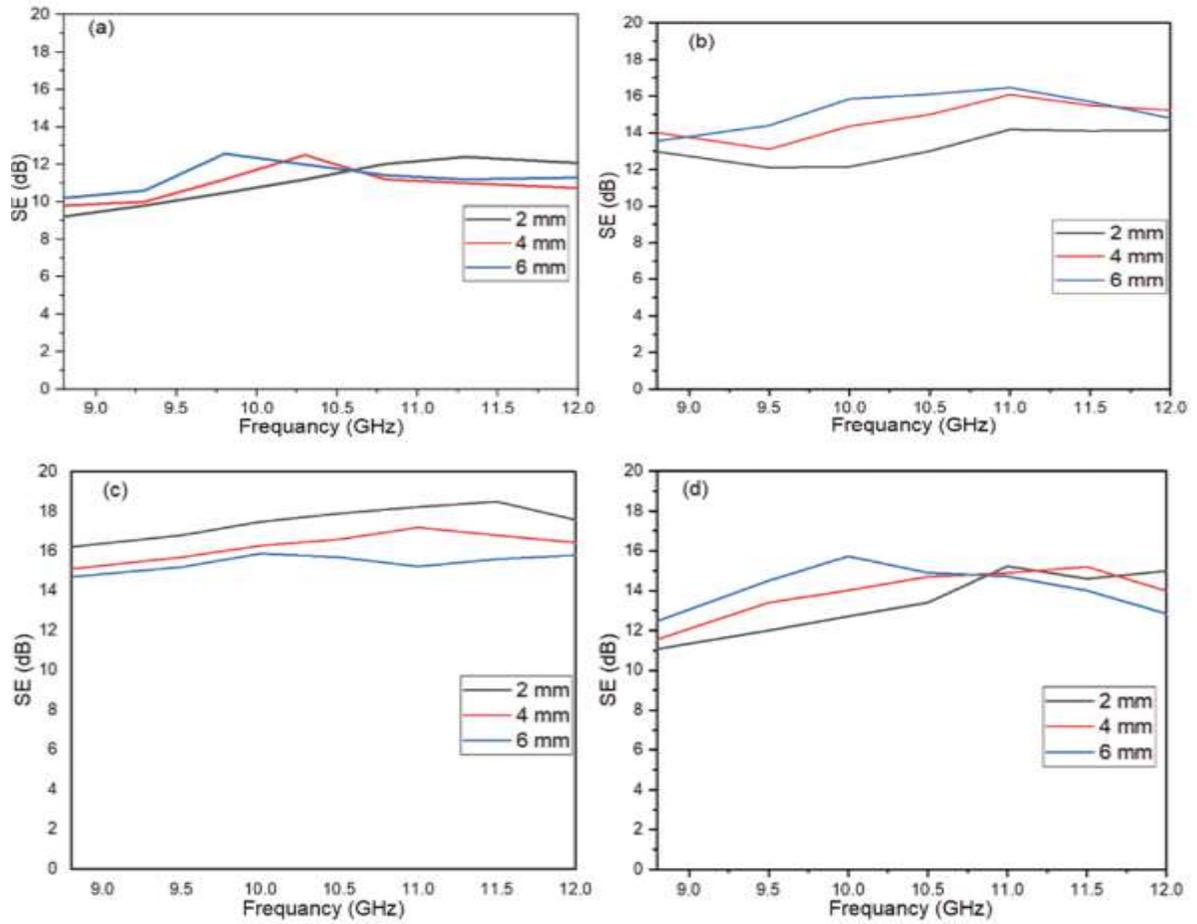


Figure 5 – SE curves of (a) CB/F-10 nanocomposite, (b) CB/F-11 nanocomposite, (c) CB/F-21 nanocomposite and (d) CB/F-31 nanocomposite at various thicknesses (2–4–6 mm).

Table 2 – MA behavior of CB/Mn_{0.1}Ni_{0.5}Zn_{0.4}Fe₂O₄ nanocomposites at various thicknesses (2–4–6 mm).

Nanocomposite samples	t (mm)	RL _{min} (dB)	f _m (GHz)	BW _{-10 dB} (GHz)	SD (kg/m ²)	BW _{-10 dB} /SD (GHz.m ² /kg)
CB/F-10	2	-11.6	10.9	0.7	2.91	0.24
	4	-12.5	10.4	0.8	2.92	0.27
	6	-11.3	9.8	0.3	2.94	0.10
CB/F-11	2	-14.7	11.5	2.0	3.63	0.55
	4	-15.8	11.0	3.2	3.65	0.88
	6	-13.9	10.1	2.9	3.66	0.79
CB/F-21	2	-18.3	11.4	3.2	3.40	0.94
	4	-17.2	10.5	3.2	3.41	0.94
	6	-17.1	10.0	2.8	3.43	0.82
CB/F-31	2	-15.1	11.0	2.5	3.09	0.81
	4	-14.6	10.6	2.9	3.11	0.93
	6	-16.7	9.9	2.6	3.12	0.83

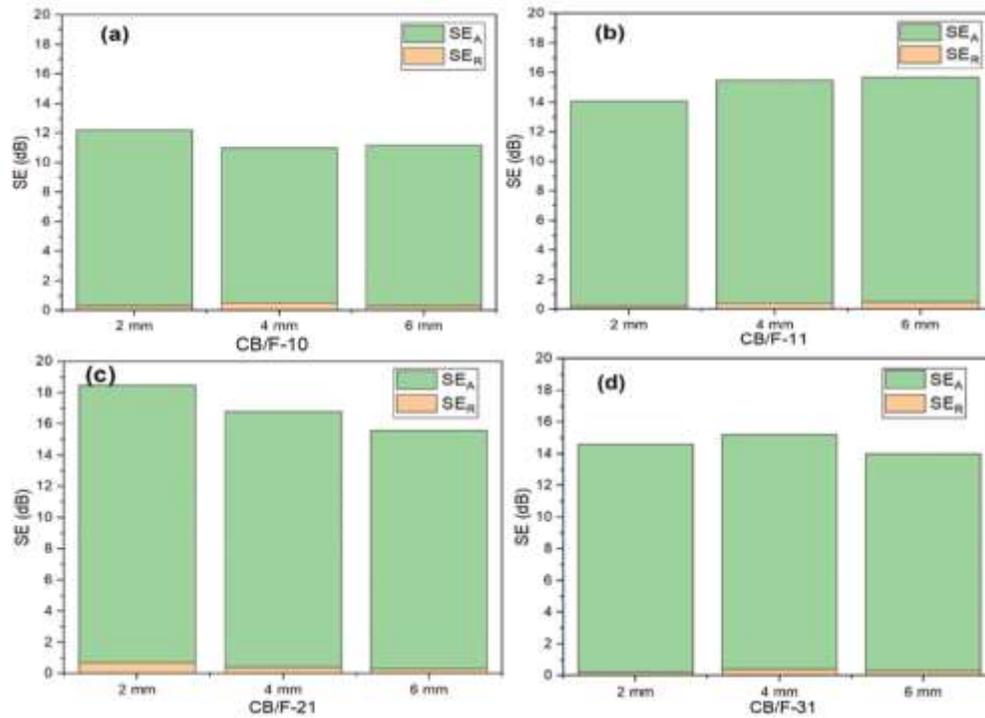


Figure 6 – Bar plot for individual components of SE_R and SE_A of (a) CB/F-10 nanocomposite, (b) CB/F-11 nanocomposite, (c) CB/F-21 nanocomposite and (d) CB/F-31 nanocomposite with various thicknesses (2–4–6 mm) at the frequency of 11.5 GHz.

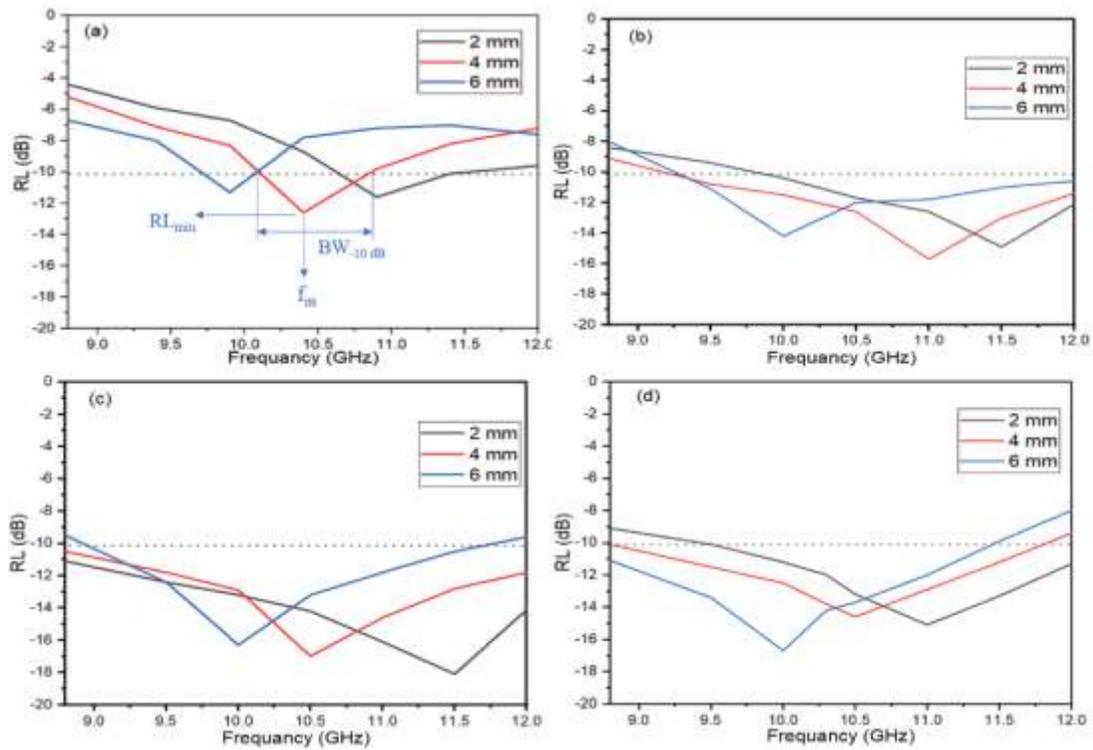


Figure 7 – RL curves of (a) CB/F-10 nanocomposite, (b) CB/F-11 nanocomposite, (c) CB/F-21 nanocomposite, and (d) CB/F-31 nanocomposite at various thicknesses (2–4–6 mm).

Conclusions

In this work, a unique type of lightweight microwave absorber was prepared by using a combination of CB/Mn_{0.1}Ni_{0.5}Zn_{0.4}Fe₂O₄ within a paraffin matrix. CB was introduced to enhance the mechanism of dielectric loss, while Mn_{0.1}Ni_{0.5}Zn_{0.4}Fe₂O₄ was used to enhance the mechanism of magnetic loss. As a result, one can notice the impact of combining Mn_{0.1}Ni_{0.5}Zn_{0.4}Fe₂O₄ and CB on the EMI and MA properties of the absorber. This combination drives to an effective and low thickness microwave absorber with a wide BW_{10dB}. The results indicate that the RL_{min} of the absorber

is -18.3 dB at 11.4 GHz and the absorption BW_{10dB} is 3.2 GHz for 2 mm thickness and its SD doesn't surpass 3.66 kg/m². The maximum SE is 18.5 dB at 11.5 GHz for mm thickness of the CB/F-21 nanocomposite sample.

Acknowledgements

The authors express their gratitude to Al-Farabi Kazakh National University, the center of complex processing of mineral raw materials, and the center of physical-chemical methods of research and analyses for providing the materials and equipment to achieve this research project.

References

- 1 Lv H., Yang Z., Ong SJH., Wei C., Liao H., Xi S., et al. A Flexible Microwave Shield with Tunable Frequency-Transmission and Electromagnetic Compatibility. //Adv Funct Mater. – 2019. – Vol.29. – P.1-8.
- 2 Liang C., Qiu H., Song P., Shi X., Kong J., Gu J. Ultra-light MXene aerogel/wood-derived porous carbon composites with wall-like “mortar/brick” structures for electromagnetic interference shielding. //Sci Bull [Internet]. Science China Press. – 2020. – Vol.65. – P.616-622.
- 3 Chen X., Shi T., Zhong K., Wu G., Lu Y. Capacitive behavior of MoS₂ decorated with FeS₂@carbon nanospheres. //Chem Eng J. – 2020. – Vol.379. – Art.No 122240.
- 4 Chen S., Meng G., Kong B., Xiao B., Wang Z., Jing Z., et al. Asymmetric alicyclic amine-polyether amine molecular chain structure for improved energy storage density of high-temperature crosslinked polymer capacitor. //Chem Eng J. – 2020. – Vol.387, May. – Art.No.123662.
- 5 Cheng C., Chen Z., Huang Z., Zhang C., Tusiime R., Zhou J., et al. Simultaneously improving mode I and mode II fracture toughness of the carbon fiber/epoxy composite laminates via interleaved with uniformly aligned PES fiber webs. //Compos Part A Appl Sci Manuf. – 2020. – Vol.129. – ArtNo.105696.
- 6 Xu H., Yin X., Li X., Li M., Liang S., Zhang L., et al. Lightweight Ti 2 CT x MXene/Poly(vinyl alcohol) Composite Foams for Electromagnetic Wave Shielding with Absorption-Dominated Feature. //ACS Appl Mater Interfaces. American Chemical Society. – 2019/ - Vol.11. – P.10198-207.
- 7 Liu Y., Liu X., Wang X. Synthesis and microwave absorption properties of Ni-Zn-Mn spinel ferrites. //Adv Appl Ceram. – 2015. – Vol.114. – P.82-86.
- 8 Ari Adi W., Yunasfi Y., Mashadi M., Sahidin Winatapura D., Mulyawan A., Sarwanto Y., et al. Metamaterial: Smart Magnetic Material for Microwave Absorbing Material //In book Electromagnetic Fields and Waves, 2019. – P.1-18.
- 9 Liu P.J., Yao Z.J., Ng V.M.H., Zhou J.T., Yang Z.H., Kong L.B. Enhanced microwave absorption properties of double-layer absorbers based on spherical NiO and Co_{0.2}Ni_{0.4}Zn_{0.4}Fe₂O₄ ferrite composites. //Acta Metall Sin (English Lett. The Chinese Society for Metals). – 2018. – Vol.31. – P.171-180.
- 10 Indrusiak T., Pereira I.M., Heitmann A.P., Silva J.G., Denadai Â.M.L., Soares B.G. Epoxy/ferrite nanocomposites as microwave absorber materials: effect of multilayered structure. //J Mater Sci: Mater Electron. – 2020. – Vol.31. – P.13118-13130.
- 11 Mondal K., Balasubramanian B., Gupta A., Lahcen A.A., Kwiatkowski M. Carbon Nanostructures for Energy and Sensing Applications. //J Nanotechnol. – 2019. – Vol.2019. – P.10-12.
- 12 Kwiatkowski M., Policicchio A., Seredych M., Bandosz T.J. Evaluation of CO₂ interactions with S-doped nanoporous carbon and its composites with a reduced GO: Effect of surface features on an apparent physical adsorption mechanism. //Carbon N Y. – 2016. – Vol.98. – P.250-257.
- 13 Ting T.H., Yu R.P., Jau Y.N. Synthesis and microwave absorption characteristics of polyaniline/NiZn ferrite composites in 2–40 GHz. //Mater Chem Phys. – 2011. – Vol.126. – P.364-370.
- 14 Houbi A., Zharmenov A.A., Atassi Y., Bagasharova Z.T., Mirzalieva S., Kadyrakunov K. Microwave absorbing properties of ferrites and their composites: A review. //J Magn Magn Mater. – 2021. – Vol.529. – Art.No.167839.
- 15 Anh L.T.Q., Van Dan N. A microwave-absorbing property of super-paramagnetic zinc–nickel ferrite nanoparticles in the frequency range of 8–12 GHz. //Appl Phys A Mater Sci Process. – 2020. – Vol.126. – P.1-6.
- 16 Chakradhary V.K. and Akhtar M.J. Microwave absorption properties of strontium ferrite and carbon black based

- nanocomposites for stealth applications //2017 IEEE Asia Pacific Microwave Conference (APMC). – 2017. – P.678-681.
- 17 El Nahrawy A.M., El-Deen H.S., Soliman A.A., Mosa W.M.M. Crystallographic and magnetic properties of Al₃+co-doped NiZnFe₂O₄ nano-particles prepared by sol-gel process. //Egypt J Chem. – 2019. – Vol.62. – P.925-957.
 - 18 Hu E., Hu X., Liu T., Fang L., Dearn K.D., Xu H. The role of soot particles in the tribological behavior of engine lubricating oils //Wear. – 2013. – Vol.304. – P.152-161.
 - 19 Kondawar S.B., Nandapure A.I. Magnetic and electrical properties of zinc-substituted nickel ferrite reinforced conducting polyaniline nanocomposites. //J Chinese Adv Mater Soc. – 2014. – Vol.2. – P.186-198.
 - 20 Figueroa Ramírez S.J., Miranda-Hernández M. Carbon film electrodes as support of metallic particles. //Int J Electrochem Sci. – 2012. – Vol.7. – P.150-166.
 - 21 Kim S.Y., Kwon S.H., Liu Y.D., Lee J.S., You C.Y., Choi H.J. Core-shell-structured cross-linked poly(glycidyl methacrylate)-coated carbonyl iron microspheres and their magnetorheology. //J Mater Sci. – 2014. – Vol.49. –P.1345-1352.
 - 22 Verma P., Bansala T., Chauhan S.S., Kumar D., Deveci S., Kumar S. Electromagnetic interference shielding performance of carbon nanostructure reinforced, 3D printed polymer composites. //J Mater Sci. – 2021. – Vol.56. – P.11769-11788.
 - 23 Bayat M., Yang H., Ko F.K., Michelson D., Mei A. Electromagnetic interference shielding effectiveness of hybrid multifunctional Fe₃O₄/carbon nanofiber composite. //Polymer (Guildf). – 2014. – Vol.55. – P.936-943.
 - 24 Hong Y.K., Lee C.Y., Jeong C.K., Lee D.E., Kim K., Joo J. Method and apparatus to measure electromagnetic interference shielding efficiency and its shielding characteristics in broadband frequency ranges. //Rev Sci Instrum. – 2003. – Vol.74. – P.1098.
 - 25 Wang S., Jiao Q., Shi Q., Zhu H., Feng T., Lu Q., et al. Synthesis of porous nitrogen-doped graphene decorated by γ -Fe₂O₃ nanorings for enhancing microwave absorbing performance. //Ceram Int. – 2020. – Vol.46. – P.1002-1010.
 - 26 Shu R., Zhang J., Guo C., Wu Y., Wan Z., Shi J., et al. Facile synthesis of nitrogen-doped reduced graphene oxide/nickel-zinc ferrite composites as high-performance microwave absorbers in the X-band. //Chem Eng J. – 2020. – Vol.384. – Art.No123266.
 - 27 Jaiswal R., Agarwal K., Kumar R., Kumar R., Mukhopadhyay K., Prasad N.E. EMI and microwave absorbing efficiency of polyaniline-functionalized reduced graphene oxide/ γ -Fe₂O₃/epoxy nanocomposite. //Soft Matter. – 2020. – Vol.16. – P.6643-6653.
 - 28 Ali N.N., Atassi Y., Salloum A., Malki A., Jafarian M., Almarjeh R.K.B. Lightweight broadband microwave absorbers of core-shell (polypyrrole/NiZn ferrite) nanocomposites in the X-band: insights on interfacial polarization. //J Mater Sci Mater Electron. – 2019. – Vol.30. – P.6876-6887.

References

- 1 H. Lv, Z. Yang, S.J. H. Ong, C. Wei, H. Liao, S.Xi, Y. Du, G. Ji, and Z.J. Xu, Adv. Funct. Mater., 29, 1-8 (2019).
- 2 C. Liang, H. Qiu, P. Song, X. Shi, J. Kong, and J. Gu Sci., Bull., 65, 616-622 (2020).
- 3 X. Chen, T. Shi, K. Zhong, G. Wu, and Y. Lu, Chem. Eng. J, 379, 122240 (2020).
- 4 S. Chen, G. Meng, B. Kong, B. Xiao, Z. Wang, Z. Jing, Y. Gao, G. Wu, H. Wang, and Y. Cheng, Chem. Eng. J, 387, 123662 (2020).
- 5 C. Cheng, Z. Chen, Z. Huang, C. Zhang, R. Tusiime, J. Zhou, Z. Sun, Y. Liu, M. Yu, and H. Zhang, Compos. Part A Appl. Sci. Manuf., 129, 105696 (2020).
- 6 H. Xu, X. Yin, X. Li, M. Li, S. Liang, L. Zhang, and L. Cheng, ACS Appl. Mater. Interfaces 11, 10198 (2019).
- 7 Y. Liu, X. Liu, and X. Wang, Adv. Appl. Ceram., 114, 82-86 (2015).
- 8 W. Ari Adi, Y. Yunasfi, M. Mashadi, D. Sahidin Winatapura, A. Mulyawan, Y. Sarwanto, Y. Edi Gunanto, and Y. Taryana, Electromagn Fields Waves, 1-18 (2019).
- 9 P.J. Liu, Z.J. Yao, V.M. H. Ng, J.T. Zhou, Z.H. Yang, and L.B. Kong, //Acta Metall. Sin. (English Lett. The Chinese Society for Metals), 31, 171-180 (2018).
- 10 T. Indrusiak, I.M. Pereira, A.P. Heitmann, J.G. Silva, Â.M.L. Denadai, and B.G. Soares //J. Mater. Sci. Mater. Electron., 31, 13118-13130 (2020).
- 11 K. Mondal, B. Balasubramaniam, A. Gupta, A.A. Lahcen, and M. Kwiatkowski //J. Nanotechnol, 2019, 10-12 (2019).
- 12 M. Kwiatkowski, A. Policicchio, M. Seredych, and T.J. Badosz, Carbon N. Y., 98, 250-257 (2016).
- 13 T.H. Ting, R.P. Yu, and Y.N. Jau, Mater. Chem. Phys., 126, 364-370 (2011).
- 14 A. Houbi, A.A. Zharmenov, Y. Atassi, Z.T. Bagasharova, S. Mirzalieva, K. Kadyrakunov, J Magn Magn Mater., 529 167839 (2021).
- 15 L.T.Q. Anh and N. Van Dan, Appl. Phys. A Mater. Sci. Process., 126, 1-6 (2020).
- 16 V.K. Chakradhary and M.J. Akhtar, 2017 IEEE Asia Pacific Microwave Conference (APMC), 678-681 (2017).
- 17 A.M. El Nahrawy, H.S. El-Deen, A.A. Soliman, and W.M.M. Mosa, Egypt. J. Chem., 62, 925-957 (2019).
- 18 E. Hu, X. Hu, T. Liu, L. Fang, K.D. Dearn, and H. Xu, Wear, 304, 152-161 (2013).
- 19 S.B. Kondawar and A.I. Nandapure, J. Chinese Adv. Mater. Soc., 2, 186-198 (2014).

-
- 20 S.J. Figueroa Ramírez and M. Miranda-Hernández, *Int. J. Electrochem. Sci.*, 7, 150-166 (2012).
 - 21 S.Y. Kim, S.H. Kwon, Y.D. Liu, J.S. Lee, C.Y. You, and H.J. Choi, *J. Mater. Sci.*, 49, 1345-1352 (2014).
 - 22 P. Verma, T. Bansala, S.S. Chauhan, D. Kumar, S. Deveci, and S. Kumar/ *J. Mater. Sci.*, 56, 11769 (2021).
 - 23 M. Bayat, H. Yang, F.K. Ko, D. Michelson, and A. Mei, *Polymer (Guildf)*, 55, 936-943 (2014).
 - 24 Y.K. Hong, C.Y. Lee, C.K. Jeong, D.E. Lee, K. Kim, and J. Joo, *Rev. Sci. Instrum.*, 74, 1098 (2003).
 - 25 S. Wang, Q. Jiao, Q. Shi, H. Zhu, T. Feng, Q. Lu, C. Feng, H. Li, D. Shi, and Y. Zhao, *Ceram. Int.*, 46, 1002-1010 (2020).
 - 26 R. Shu, J. Zhang, C. Guo, Y. Wu, Z. Wan, J. Shi, Y. Liu, and M. Zheng, *Chem. Eng. J.*, 384 123266 (2020).
 - 27 R. Jaiswal, K. Agarwal, R. Kumar, R. Kumar, K. Mukhopadhyay, and N.E. Prasad, *Soft Matter*, 16, 6643 (2020).
 - 28 N.N. Ali, Y. Atassi, A. Salloum, A. Malki, M. Jafarian, and R.K.B. Almarjeh, *J. Mater. Sci. Mater. Electron.*, 30, 6876-6887 (2019).

4-бөлім

**ЖЫЛУ ФИЗИКАСЫ ЖӘНЕ
ТЕОРИЯЛЫҚ ЖЫЛУ ТЕХНИКАСЫ**

Section 4

**ТЕПЛОФИЗИКА И
ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ТЕПЛОТЕХНИКА**

Раздел 4

**THERMOPHYSICS AND
THEORETICAL HEAT ENGINEERING**

K.O. Toleubekov^{1,2} , V.V. Baklanov¹ , A.S. Akayev¹ , M.K. Bekmuldin^{1,2*} 

¹Institute of Atomic Energy NNC RK, Kazakhstan, Kurchatov

²Shakarim University, Kazakhstan, Semey

*e-mail: bekmuldin@nnc.kz

MODELING THE PROCESS OF DECAY HEAT IMITATION IN THE CORIUM AT THE «LAVA-B» FACILITY

It is known that corium is produced during the development of a severe accident at a nuclear power plant from a melt of core materials [1]. An important feature of the corium formed in an operating reactor is the presence of decay heat. Thus, it is especially important to take into account the presence of decay heat when conducting calculations and physical experiments, since it influences significantly on the nature of interaction between corium melt and structure materials of a reactor facility. For that reason, methods of decay heat simulation are subject to quite serious requirements to the depth and intensity of energy release in the corium when conducting different experiments.

This article considers induction and plasmatron heating technologies as methods to simulate decay heat in corium at the Lava-B facility. Characteristics of the selected methods of heating the corium prototype was analyzed by means of computer modeling. As a result of the work, parameters of melt heating using each of the considered methods were determined, and they were also compared. The used thermophysical models were created in the widely known ANSYS software based on the experimental section, which was used in one of the experiments at the Lava-B facility [2]. The main parameters of the corium-heater system were obtained by computer modeling for each of the considered methods and limits of their applicability for simulation of decay heat were determined when conducting the experiments at the facility.

Key words: corium, inductor, plasmatron, decay heat, Lava-B facility, ANSYS, non-stationary calculation

К.О. Төлеубеков^{1,2}, В.В. Бакланов¹, А.С. Ақаев¹, М.К. Бекмулдин^{1,2*}

¹ҚР ҰЯО РМК «Атом энергиясы институты» филиалы, Қазақстан, Курчатов қ.

²Семей қаласының Шәкәрім атындағы университеті, Қазақстан, Семей қ.

*e-mail: bekmuldin@nnc.kz

«Лав-В» қондырғысында кориумдағы қалдық энергия бөлу процесін модельдеу

Белгілі болғандай, атом электр станциясындағы ауыр апаттың даму процесінде кориумның пайда болуы жүреді – белсенді аймақ материалдарының балқуы [1]. Белсенді реакторда пайда болатын кориумның маңызды ерекшелігі - қалдық энергияның болуы. Осылайша, есептік зерттеулер мен физикалық эксперименттер жүргізу кезінде қалдық энергия бөлінуінің болуын ескеру маңызды, өйткені ол кориум балқымасының реакторлық қондырғының конструкциялық материалдарымен өзара іс-қимылының сипатына елеулі үлес қосады. Осы себепті, кориум прототипіндегі қалдық энергияны бөлуді модельдеу әдістеріне көлемді үлестірудің біркелкілігіне де, оның қарқындылығына да қатысты айтарлықтай талаптар қойылады.

Ұсынылған мақалада «Лав-В» қондырғысына қатысты кориумдағы қалдық энергия бөлуді модельдеудің индукциялық және плазмалық әдістері қарастырылған. Кориум прототипін жылытудың таңдалған әдістерінің сипаттамаларын талдау компьютерлік модельдеу арқылы жүргізілді. Жүргізілген жұмыс нәтижесінде қарастырылған әдістердің әрқайсысы балқыманың қыздыру параметрлерін анықтады, сонымен қатар оларды салыстыру жүргізілді. Қолданылатын термофизикалық модельдер бұрын «Лав-В» қондырғысындағы эксперименттердің бірінде қолданылған эксперименттік секция негізінде кеңінен танымал ANSYS бағдарламалық кешенінде жасалды [2]. Компьютерлік модельдеу әдісімен таңдалған әдістердің әрқайсысы үшін корий-жылытқыш жүйесінің негізгі параметрлері алынды және қондырғыда эксперимент жүргізу кезінде қалдық энергия бөлуді имитациялау үшін олардың қолданылу шекаралары анықталды.

Түйін сөздер: кориум, индуктор, плазматрон, қалдық энергия бөлу, «Лав-В» қондырғысы, ANSYS, стационарлық емес есептеу

К.О. Толеубеков^{1,2}, В.В. Бакланов¹, А.С. Акаев¹, М.К. Бекмулдин^{1,2*}

¹Филиал «Институт атомной энергии» РГП НЯЦ РК, Казахстан, г.Курчатов

²Университет имени Шакарима города Семей, Казахстан, г.Семей

*e-mail: bekmuldin@nnc.kz

Моделирование процесса остаточного энерговыделения в корииуме на установке «Лава -Б»

Известно, что в процессе развития тяжелой аварии на АЭС происходит образование корииума – расплава материалов активной зоны [1]. Важной особенностью корииума, формирующегося в действующем реакторе, является наличие остаточного энерговыделения. Таким образом, учитывать наличие остаточного энерговыделения немаловажно при проведении расчетных исследований и физических экспериментов поскольку оно вносит ощутимый вклад в характер взаимодействия расплава корииума с конструкционными материалами реакторной установки. По этой причине к методам имитации остаточного энерговыделения в прототипе корииума предъявляются достаточно серьезные требования, которые касаются, как равномерности объемного распределения, так и его интенсивности.

В представленной статье рассмотрены индукционный и плазмотронный методы имитации остаточного энерговыделения в корииуме применительно к установке «Лава-Б». Анализ характеристик выбранных методов нагрева прототипа корииума выполнялся посредством компьютерного моделирования. В результате проведенной работы определены параметры нагрева расплава каждым из рассматриваемых методов, а также произведено их сравнение. Применяемые теплофизические модели были созданы в широко известном программном комплексе ANSYS на основе экспериментальной секции, которая применялась ранее в одном из экспериментов на установке «Лава-Б» [2]. Способом компьютерного моделирования получены основные параметры системы корииум-нагреватель для каждого из выбранных методов и определены границы их применимости для имитации остаточного энерговыделения при проведении эксперимента на установке.

Ключевые слова: корииум, индуктор, плазмотрон, остаточное энерговыделение, установка «Лава-Б», ANSYS, нестационарный расчет

Introduction

The most severe accidents of nuclear power plant reactors are accompanied by core melting and corium formation. Corium is a melt with a radioactive mixture of uranium oxide, zirconium, zirconium oxides and steel components (products of high-temperature interaction of metals with an oxidizing environment) and other structural elements. The escape of corium, under certain conditions, beyond the borders of the reactor plant is a very real scenario due to a large amount of stored energy and the presence of decay heat in the corium. That is, nuclear fuel contained in the corium melt continues to be a source of heat releasing due to the decay of ²³⁵U nuclear fission fragments accumulated during the operation of the reactor. This allows the corium to remain in a liquid state for a long time and melt the reactor construction with its subsequent escape to the surface of the ground and even groundwater.

Obviously, it is necessary to conduct experimental studies on the interaction of corium with the structural elements of the reactor plant in order to prevent such a scenario of the development of a severe accident at a nuclear power plant. For example, such experiments are in demand in studies

of in-vessel and ex-vessel corium retention. They were and are being conducted as part of concept to design and establish severe accident management systems by cooling, controlled movement and localization of the core melt, both inside the reactor vessel and outside it [3].

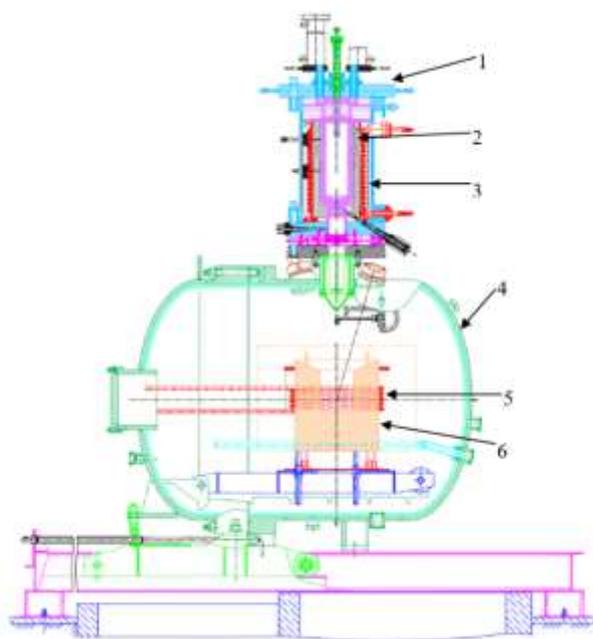
In such experiments on the physical modeling of processes occurring during severe accidents, a corium imitator is used, which called "prototype corium". The prototype of corium is a replacement for real corium. Its characteristics are close to real corium in most parameters, but do not create a dose load on people (*hereinafter as corium is understood a "prototype of corium"*). Therefore, the essential difference between the prototype and the real corium is that the first one is not a source of heat. That is, there is no self-sustaining radioactive decay in the prototype corium [4].

To ensure modeling conditions that are as close as possible to natural ones, it is necessary to take into account not only the compliance of prototype corium composition to real one, but also the energy release in the melt within a given level. Thus, the device that provides the energy release in the corium must imitate the fission reaction both in magnitude and in the nature of its distribution in the volume of the corium.

Several experimental facilities have been created in the world where such studies can be conducted, however, they differ not only in design, but also in the methods used to imitate decay heat [5-10].

Among the mentioned experimental complexes allowing for various studies of the final stage of a severe accident with the melting of the core, the LAVA-B facility is considered (Fig.1). Experimental facility is designed to solve a wide range of tasks with a corium and operated by the "Institute of Atomic

Energy" branch of the National Nuclear Center of the Republic of Kazakhstan [11]. The Lava-B facility includes two main functional units: an electric melting furnace for the preparation of corium melt and a melt receiver, where concrete vessel for experimental study is placed. The facility allows melting up to 60 kg of a prototype mixture of LWR core materials by induction melting in a "hot crucible" followed by pouring the melt into the experimental section.



1– EMF (electric melting furnace), 2 – graphite crucible, 3 – EMF inductor, 4 – MR (melt receiver), 5 – MR inductor, 6 – concrete trap.

Figure 1 – Outer view and scheme of “Lava-B” facility

Currently, several research works were conducted at the «Lava-B» facility under various programs. They are connected with experiments to study the interaction of corium with structural elements of a nuclear reactor, reactor vessel, containment building, as well as with the sacrificial materials of core catcher of an NPP [12-14].

Depending on the object and goals of study, both induction and plasmatron heating of the corium are applied in the experimental section of the Lava-B facility as a method of imitate decay heat [15-16]. In order to ensure required quality of the conducting researches, it is necessary to study the heating of the corium melt in an experimental section by methods using at the “Lava-B” facility as well as to compare them to justify the most optimal method for decay heat imitation during physical modeling of the

situation of an ex- vessel severe accident at a nuclear power plant.

The most effective way that allows to consider two methods of decay heat imitation with minimal costs is the computer modeling method. Computer modeling of thermophysical processes of melt heating in the experimental section allows:

1) preliminarily estimating the temperature fields established during the interaction of the corium melt with various substances under a given heating device mode in order to prevent heating of the elements of the experimental section above the allowable temperatures;

2) estimate the characteristics of the heating device required to establish a certain temperature field in a particular experiment;

3) analyze the thermophysical processes

occurring in the experimental section based on a comparison of the results of computer modeling and experimental data.

Thus, in this article, the induction and plasmatron heating methods are considered by computer modeling method in order to obtain the

Object statement of decay heat modeling

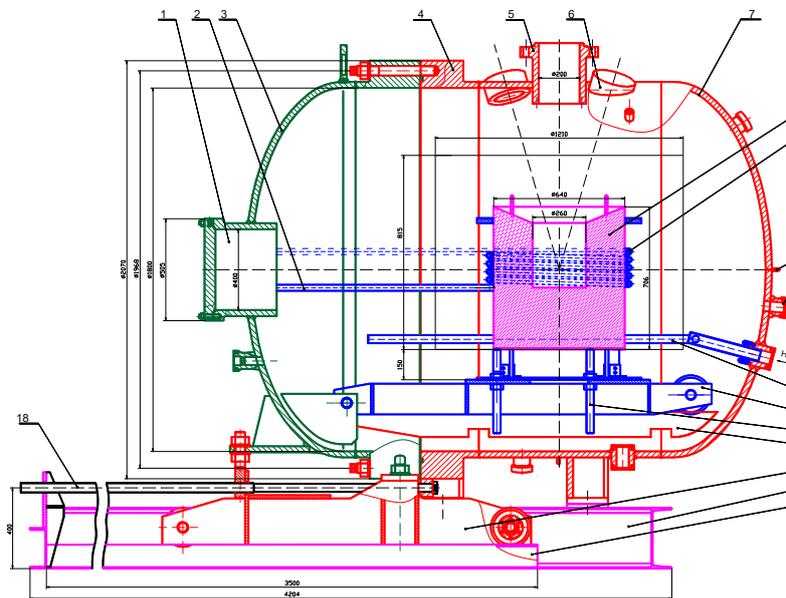
The objective of this work is choosing a decay heat simulation method for physical modeling of a severe accident at a nuclear power plant using the «Lava-B» facility.

To achieve this goal, in this article, an experimental situation is simulated when the melt of

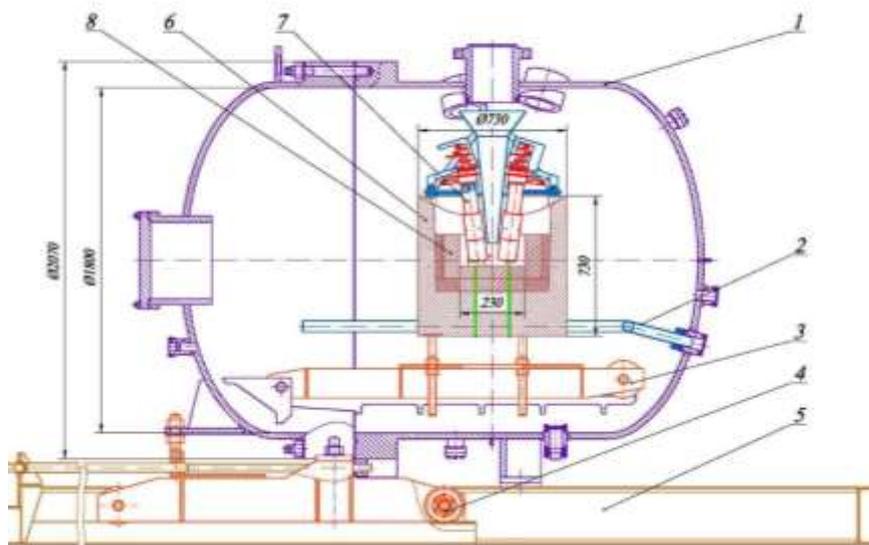
parameters of the melt-heater system. The advantages and disadvantages of each melt heating method are determined as well as the limits of their applicability were determined for decay heat simulation during the experiments on the «Lava-B» facility.

the corium prototype is poured into a special melt trap for its interaction with various materials. Calculations of the thermal state of the thermophysical model were performed using the ANSYS software [17].

Figure 2 shows the schematic diagrams of the experimental section of the «Lava-B» facility with an induction and plasmatron heaters [18].



a) induction heater



b) plasmatron heaters

Figure 2 – Schematic diagram of the «Lava-B» facility with induction and plasmatron heaters

The thermophysical model for calculations was created based on the scheme of a special experimental melt trap (Fig.3) which was used in the one of experiments at the “Lava-B” facility. Induction heater was used as a method of decay heat simulation. As for the thermophysical model of plasmatron heating, it was created similarly to the model with induction heating of the melt. However, there are little changes in the scheme, taking into account the presence of plasmatron heaters.

Due to the symmetry of the trap relatively to the central axis, for modeling heat transfer in the melt trap, the following were created:

- Two-dimensional axisymmetric computational domain of thermophysical model of induction heating of melt in the trap;

- The fourth part of a three-dimensional axisymmetric computational domain of thermophysical model of plasmatron heating of melt in the trap.

Computational domains of thermophysical models of traps are presented in Figure 4.

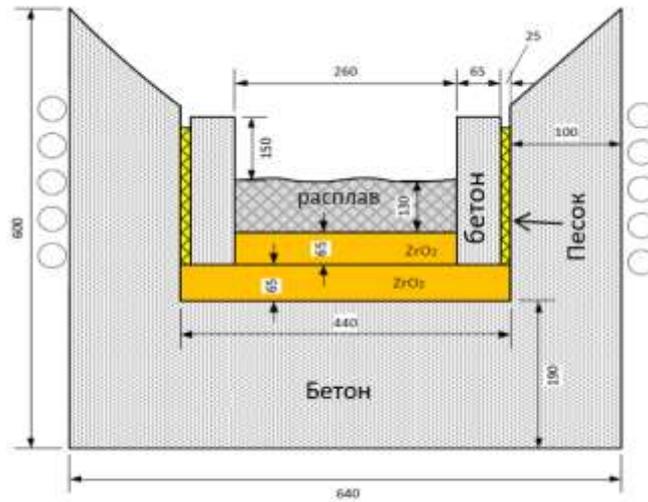


Figure 3 – Scheme of the experimental melt trap of the “Lava-B” facility

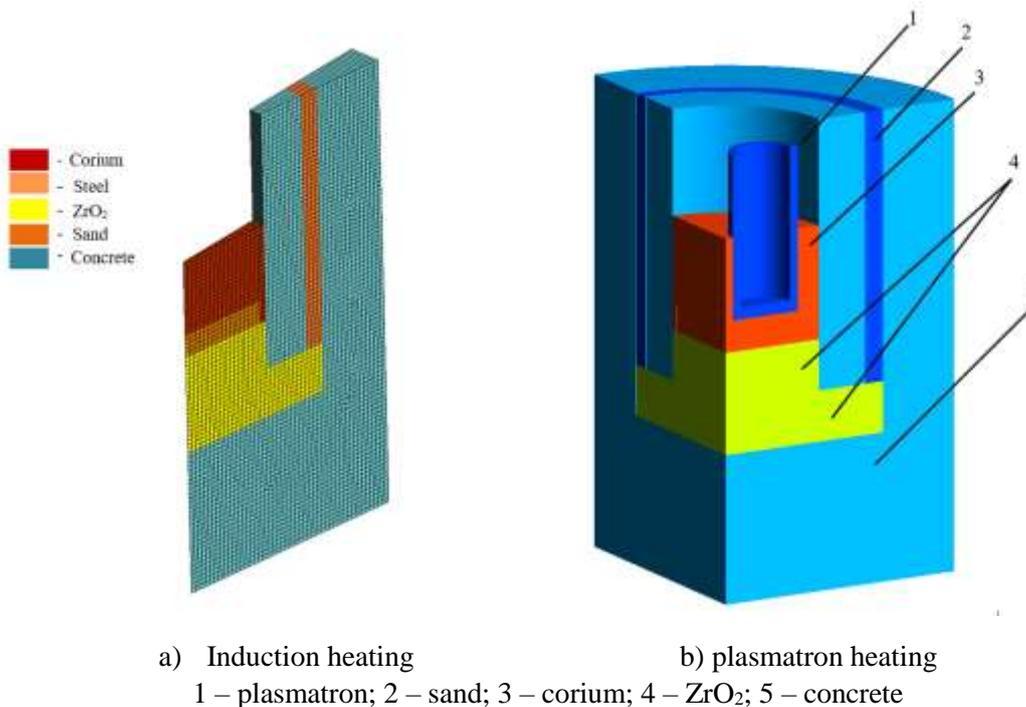


Figure 5 – Computational domains of thermophysical models of traps
 a) Induction heating b) plasmatron heating
 1 – plasmatron; 2 – sand; 3 – corium; 4 – ZrO₂; 5 – concrete

Figure 5 – Computational domains of thermophysical models of traps

To compare the two melt heating methods in each of the calculations are equivalent:

- Initial conditions (initial corium temperature 2500 °C);
- Mass of corium;
- Thermophysical properties of materials;
- The power released in the melt for both types of melt heating (the power released in the melt was 35 kW);
- The estimated heating time is 30 minutes.

The heat release in the melt was set depending on the features of induction and plasmatron heating:

1) The surface effect of penetration deep into the materials of the electromagnetic field of the inductor or the skin effect (in this calculation, 70% of the total heat was released on the surface layer). The depth of this surface layer is determined by the theory of induction facilities [19].

2) In the case of the plasmatron method, an approach was used according to which the heat transferred to the corium is set on the internal surface of the graphite tip of plasmatrons in the area of electric arc formation. This simplification allows to accelerate and simplify the calculations significantly courtesy of reducing the number of elements in the thermophysical model. Thus, in this case only the presence an external surface of graphite as a source of heat in the model is sufficient.

Validation of the described methods for modeling decay heat in the corium was conducted

earlier and, therefore, they can be used for non-stationary calculations of temperature changes in trap elements [20-21].

The thermophysical models take into account:

- The dependence of the properties of the trap elements on temperature;
- Heat exchange by radiation;
- Convective heat exchange between the external surfaces of the model and the environment.

Some properties of corium during computer modeling were used according to literary sources [22-23]. It should be noted that due to shortages of data about dependence of the coefficient of thermal conductivity of corium on temperature, its value was set as a constant. The value of the thermal conductivity coefficient was set similarly to the previously performed calculations of corium heating in the ISTC project No. K-1265 under the INVECOR program [24-25].

The thermophysical properties of the trap elements were used according to the literary source [26].

Results of computer modeling of decay heat in the corium at the “Lava-B” facility

Figure 5 shows results of calculating the heating of the corium in the melt trap by the induction method.

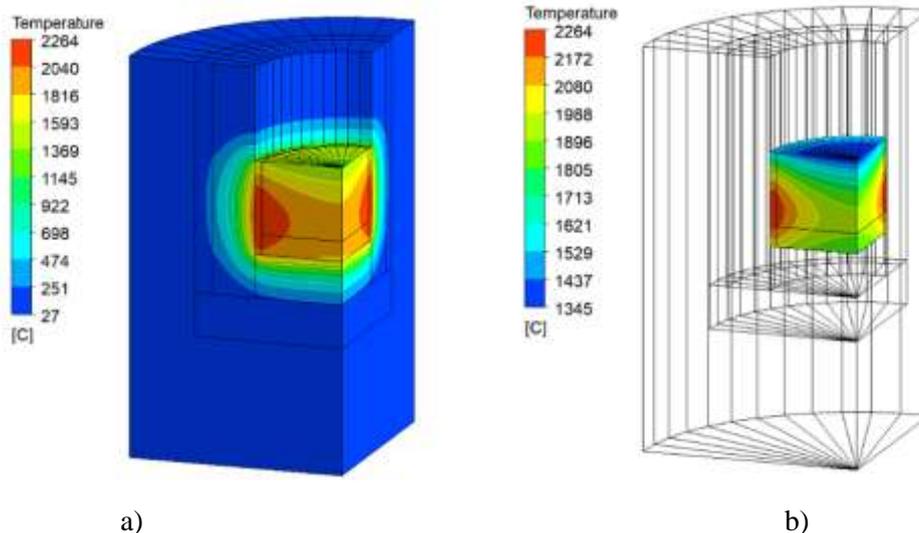


Figure 5 – Temperature distribution of the model during induction heating

Throughout the calculation, heat is released on the side surface of the corium melt. Heat is transferred from the area of heat release to the central volumes of the corium due to heat conduction. Figure 5b shows that the minimum temperatures in corium are observed on the surface of the melt. This can be

explained by radiation from the surface of corium, as well as by convective heat exchange with the environment.

Figure 6 shows results of calculating the heating of the corium in the melt trap by the plasmatron method.

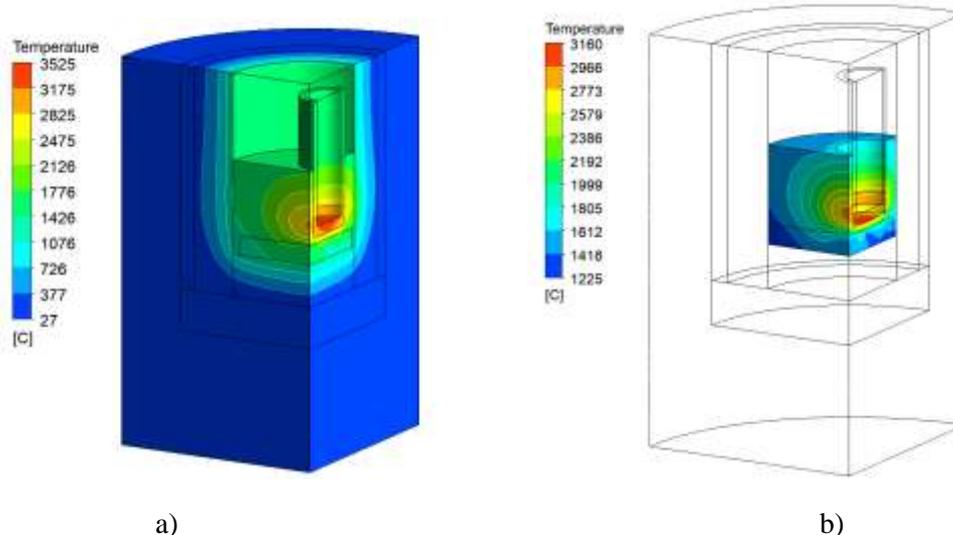


Figure 6 – Temperature distribution of the model during plasmatron heating

Figure 6 shows that the distribution of heat in the corium during plasmatron method occurs from the heat-generating area of the heater to the side surfaces. Minimum temperatures are observed in the corium-wall boundary area. Obviously, this is due to the remoteness of the heat release area and the active heat

exchange process between the trap materials and the corium. It leads to a significant decrease in the temperature of the corium in that area.

Table 1 shows the calculated values of corium temperatures obtained during computer modeling.

Table 1. Calculated corium temperature

Parameter	Induction heating	Plasmatron heating
Average temperature of corium, °C	2009	2193
Maximum corium temperature, °C	2264	3160
Minimum corium temperature, °C	1345	1225

As shown in Table 1, when using plasmatron heating, the maximum corium achieved temperature is significantly higher compared to the induction heating method. The advantage of plasmatron heating is also seen in the case of comparing the average volume temperatures of corium. According to table 1, it can be argued about the advantage of the plasmatron method of decay heat imitation over induction.

Plasmatron heaters are based on the method of indirect electric arc heating [27]. In the construction of the plasmatron heaters used in the “Lava-B” facility, an electric arc is formed, the temperature of which can reach several thousand degrees. The heat from the electric arc is transferred through a special protective graphite tip to the corium melt. Thus, considering the high temperature that arises in the plasmatron heater, high temperatures comparable to

the temperature inside the heaters will be observed in the area of their contact with the corium melt.

The presence of a small area of corium heated to higher temperatures compared to the rest of corium areas leads to an increase in the average temperature of the entire corium. In this regard, the data in Table 1 don't allow an objective comparison of the two heating methods.

When comparing the temperature fields of two thermophysical models (Fig.5b and Fig.6b), it is seen that with induction heating, corium heating is more uniform due to volumetric heat release of energy. This is confirmed if we look at the graph of the temperature distribution in a random section (from the center to the periphery) in the corium, shown in Figure 7. The temperature distribution during induction heating is more uniform. At the same time, when using plasmatron heating a large temperature gradient is observed.

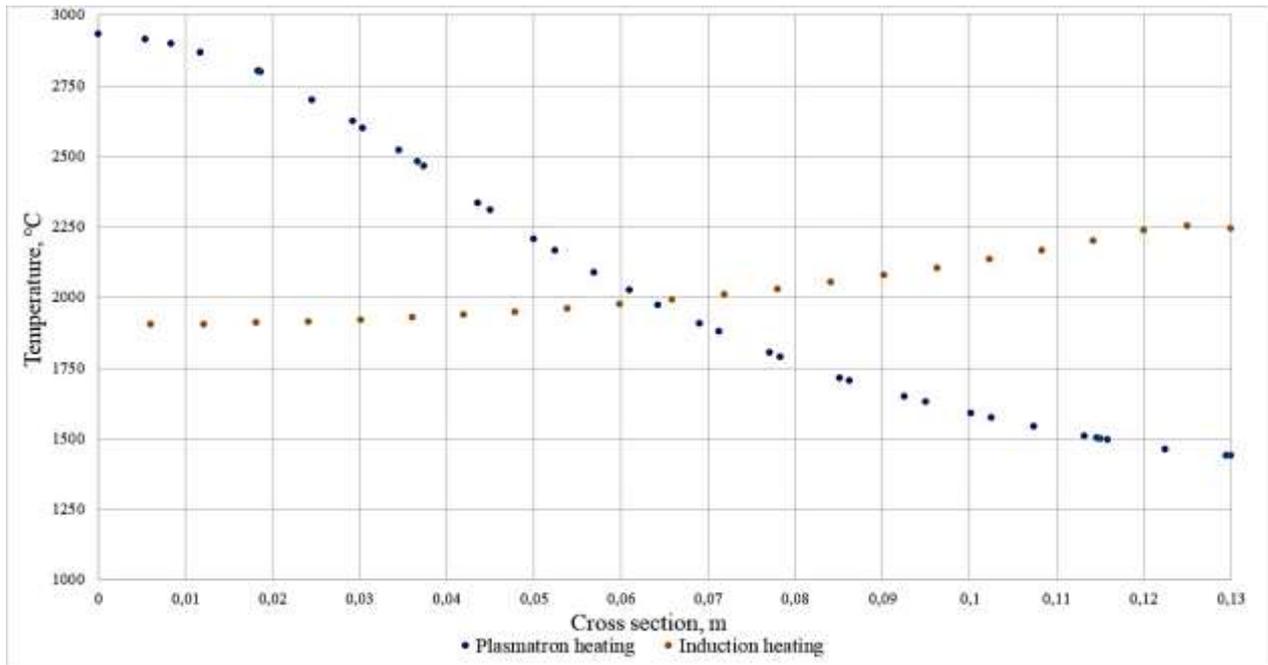


Figure 7 – Temperature distribution in the melt

Conclusion

Modeling of decay heat imitation at the “Lava-B” facility by induction and plasmatron heating methods was performed using ANSYS software. The calculation was performed under the same initial conditions to compare these methods. The objective of calculation was to choose the most optimal method of decay heat simulation for the studying the processes of a ex-vessel accident at NPP when localization corium in the core catcher.

Numerical calculations have shown that higher corium temperatures can be achieved when using plasmatron heaters compared to an induction heater. This feature of plasmatron heaters can be used when conducting experiments with corium, especially in cases where it is impossible to use an induction heater. For example, in experiments with the study of the interaction of corium with materials that can be heated by the action of the electromagnetic field of the inductor.

However, in the context of future experiments at the “Lava-B” facility [28], an induction heater is more preferable method of decay heat imitation. In the case of induction heating, heat is released on the side surface of the corium within the skin layer. The volumetric release of energy by an induction heater allows to obtain a more uniform thermal field, and the release of energy in the area of constant heat exchange processes of corium with trap materials allows to maintain corium in a molten state. It allows bringing the experimental situation closer to real processes.

At the same time, a small heat-releasing surface of plasmatron heaters leads to the formation of a large temperature gradient in corium. Under certain conditions, solidification of corium is expected in the areas most remote from the heaters, especially in areas of intensive heat exchange of corium with trap materials. In this regard, it is necessary to use a complex system of heaters placed in various parts of the corium to achieve a uniform thermal field over the entire volume and heat pattern acceptable in symmetry.

As a result of the performed calculations, it can be concluded that with an equal amount of heat that the heaters transfer to the corium melt, induction heating is more effective from the point of view of its use as a method of decay heat imitation. Thus, induction heating should be considered as method of decay heat imitation when conducting experiments at the “Lava-B” facility for achieving quite uniform temperature field over the entire volume of corium and maintaining it in the molten state for time required for study interaction of corium and considered materials.

Acknowledgement

The work is carried out within the framework of the event “Development of nuclear energy in the Republic of Kazakhstan” for 2021-2023, under the budget program “Physics and technology of nuclear power”, the topic “Investigation of the erosion properties of a composite material when interacting with corium”.

References

- 1 Арутюнян Р.В. "Китайский синдром" // Природа. – 1990. – №11. – С. 35-41.
- 2 Maruyama Y., Tahara M., Nagasaka H., Kolodeshnikov A., Zhdanov V., Vassiliev Yu. Recent results of MCCI studies in COTELS project // NTHAS3: Third Korea-Japan Symposium on Nuclear Thermal Hydraulics and Safety. – Kyeongju, Korea. – 13-16 October 2002.
- 3 Васильев Ю.С., Вурим А.Д., Жданов В.С., Зуев В.А., Кенжин Е.А., Колодешников А.А., Пахниц А.В. Экспериментальные исследования по моделированию процессов характерных для тяжелых аварий ядерных реакторов проведенные в ИАЭ // Вестник НЯЦ РК. – 2009. – Вып. 4. – С.26-54.
- 4 Christophe Journeau Contribution des essais en matériaux prototypes sur la plate-forme PLINIUS à l'étude des accidents graves de réacteurs nucléaires // Sciences de l'ingénieur [physics] // Université d'Orléans. – 2008. – 229 p.
- 5 Fink J. K., Thompson D. H., Spencer B. W., Sehgal B. R. Aerosol and melt chemistry in the ACE molten core-concrete interaction experiments // High Temperature and Materials Science. – 1995. – Vol.33(1). – P.51-76.
- 6 Journeau C., Piluso P., Haquet J.F., Voccaccio E., Saldo V., Bonnet J.M., Malaval S., Carénini L., Brissonneau L. Two-dimensional interaction of oxidic corium with concretes: The VULCANO VB test series // Annals of Nuclear Energy. – 2009. – Vol. 36. – P.1597-1613.
- 7 Foit, J. J. MCCI of a Metal and Oxide Melt with Reinforced Siliceous Concrete in МОСКА Experiments // 22nd International Conference on Nuclear Engineering (ICONE22). – Prague, Czech Republic. – 7-11 July 2014.
- 8 Farmer M.T., Kilsdonk D.J., and Aeschlimann R.W. Corium Coolability under Ex-Vessel Accident Conditions for LWRs // Nuclear Eng. Technology. – 2009. – Vol. 41. – P.575-602.
- 9 Miassoedov A., Cron T., Gaus-Liu X., Palagin A., Schmidt-Stiefel S., Wenz T. LIVE experiments on melt behavior in the reactor pressure vessel lower head // 8th International Conference on Heat Transfer, Fluid Mechanics and Thermodynamics. – Pointe Aux Piments, Mauritius. – 11 – 13 July 2011. – P.793-801.
- 10 Kim H.Y., An S.M., Jung J., Ha K.S., Song J.H. Corium melt researches at VESTA test facility // Nuclear Engineering and Technology. – 2017. – Vol. 49. – Issue 7. – P.1547-1554.
- 11 Nazarbayev N.A., Shkolnik V.S., Bатырбеков E.G. et al. Scientific, Technical and Engineering Work to Ensure the Safety of the Former Semipalatinsk Test Site. London. – 2017. – Vol.3. – P.290.
- 12 Kurita Tomohisa, Isao Sakaki, Fumiyo Sasaki, et al. Test and evaluation plan for passive debris cooling system // 9th International Conference NUCLEAR AND RADIATION PHYSICS. – 24-27 September 2013. – Almaty, Kazakhstan. – P.19-29.
- 13 Shohei Kawano, Takahiro Hayashi, Yasuo Morishima, et al. Characterization of fuel debris by large-scale simulated debris examination for Fukushima daiichi nuclear power station // Proceedings of ICAP 2017. – 24-28 April 2017. – Fukui and Kyoto (Japan). – P.1105-1110.
- 14 Назарбаев Н.А., Школьник В.С., Батырбеков Э.Г., Березин С.А., Лукашенко С.Н., Скаков М.К. Проведение комплекса научно-технических и инженерных работ по приведению бывшего Семипалатинского испытательного полигона в безопасное состояние. – т. III. – г. Курчатова. – 2016. – С.320-356.
- 15 Baklanov V., Zhdanov V et al. Experiments to justify structure of residual heat simulation assembly under INVECOR project // Bulletin of the National Nuclear Center of the Republic of Kazakhstan. – 2009. – Vol.1. – P.66 – 76.
- 16 Zhdanov V. COTELS Project (1): Overview of Project to study FCI and MCCI during a Severe Accident // OECD Workshop on Ex-Vessel Debris Coolability. – Karlsruhe, Germany. – 15-18 November 1999.
- 17 ANSYS Fluent Tutorial Guide, 2016.
- 18 Zhdanov V., Baklanov V., Bottomley P.W.D., Miassoedov A., Tromm T.W., Journeau Ch., Altstadt E., Clement B., Oriolo F. Study of the processes of corium-melt retention in the reactor pressure vessel (INVECOR) // Proceedings of ICAPP 2011. – Nice, France. – 2-5 May 2011. – P.1300-1308.
- 19 Иванова Л.И., Грובה Л.С., Сокунов Б.А., Сарапулов С.Ф. Индукционные тигельные печи: Учебное пособие. 2-е изд., перераб. и доп. // Екатеринбург: Изд-во УГТУ – УПИ. – 2002. – 87 с.
- 20 Тoleубекoв К.О., Хажидинов А.С., Акаев А.С. Моделирование индукционного нагрева при имитации остаточного энерговыделения в корюме при взаимодействии с жаропрочными материалами // Вестник НЯЦ РК. – 2021. – Вып.1. – С.9-14.
- 21 Рамазанова К.М., Зуев В.А., Гановичев Д.А., Хажидинов А.С., Акаев А. С. Расчет температурного поля корюма и огнеупорных блоков ловушки расплава установки «Лава-Б» // Вестник НЯЦ РК. – 2016. – Вып. 3. – С.134-139.
- 22 В. Г. Асмолов, В. Н. Загрязкин, Е. В. Астахова, В. Ю. Вишневецкий, Е. К. Дьяков, А. Ю. Котов, В. М. Репников Плотность UO₂-ZrO₂-расплавов // ТВТ. – 2003. – Том 41, вып. 5. – С.714-719.
- 23 И.В. Позняк, А.Н. Шатунов, А.Ю. Печенков Измерение электропроводности расплава корюма // Известия СПбГЭТУ «ЛЭТИ». – 2008. – Вып.10. – С.39-45.
- 24 <https://istc.int/ru/project/DA8802253C138C29C3257052005303CFICTS> project #K-1265 INVECOR (IN-Vessel Corium Retention in accident of water reactor) [Электронный ресурс].
- 25 https://portal.tpu.ru/portal/pls/portal/!app_ds.ds_view_bknd.download_doc?fileid=4000 Бакланов В.В. Приборно-измерительный комплекс для исследования взаимодействия материалов ядерного реактора при

тяжелых авариях: диссертация на соискание учёной степени кандидата технических наук, Юргинский технологический институт ТПУ, Югра, 2016 // [Электронный ресурс].

26 Чиркин В.С. Теплофизические свойства материалов ядерной техники. – М.: Атомиздат, 1968.

27 Жуков М.Ф. Электродуговые нагреватели газа (плазмотроны). – М.: Наука, 1973. — 232 с.

28 Bekmuddin M.K., Skakov M.K., Baklanov V.V., Gradoboyev A.V., Akaev A.S. Heat-resistant composite coating with a fluidized bed of the under-reactor melt trap of a light-water nuclear reactor // Eurasian Physical Technical Journal. – 2021. – Vol.18(3). – P. 65-70.

References

- 1 R.V. Arutyunyan, Nature, 11, 35-41 (1990). (in Russ).
- 2 Y. Maruyama et al., NTHAS3: Third Korea-Japan Symposium on Nuclear Thermal Hydraulics and Safety (Kyeongju, 13-16 October, 2002).
- 3 Yu.S. Vasiliev, A.D. Vurim, V.S. Zhdanov, V.A. Zuyev, Ye.A. Kenzhin and A.A. Kolodeshnikov, NNC RK Bulletin, 4, 26-54 (2009). (in Russ).
- 4 J. Christophe, Contribution des essais en matériaux prototypes sur la plate-forme PLINIUS à l'étude des accidents graves de réacteurs nucléaires, (Université d'Orléans, 2008), 229 p.
- 5 J. K. Fink, D. H. Thompson, B. W. Spencer and B. R. Sehgal, High Temperature and Materials Science, 33(1), 51-76 (1995).
- 6 C. Journeau, P. Piluso, J.F. Haquet, E. Boccaccio, V. Saldo, J.M. Bonnet, S. Malaval, L. Carénini and L. Brissonneau, Annals of Nuclear Energy, 36, 1597-1613 (2009).
- 7 J.J. Foit, 22nd Int. Conf. on Nuclear Engineering (ICONE22), (Prague, 7-11 July, 2014).
- 8 M.T. Farmer, D.J. Kilsdonk and R. W. Aeschlimann, Nuclear Eng. Technology, 41, 575-602, (2009).
- A. Miassoedov et al., 8th Int. Conf. on Heat Transfer, Fluid Mechanics and Thermodynamics (Pointe Aux Piments, 11 – 13 July, 2011), p.793-801.
- 9 H.Y. Kim, S.M. An, J. Jung, K.S. Ha and J.H. Song, Nuclear Engineering and Technology, 49(7), 1547-1554 (2017).
- 10 N.A. Nazarbayev, V.S. Shkolnik, E.G. Batyrbekov and et al., Scientific, Technical and Engineering Work to Ensure the Safety of the Former Semipalatinsk Test Site Vol.3, (London, 2017), p.290.
- 11 T. Kurita et al., 9th Int. Conf. Nuclear and Radiation Physics (Almaty, 24-27 September, 2013), p.19-29.
- 12 Sh. Kawano et al., Proc. of ICAP 2017 (Fukui and Kyoto, 24-28 April, 2017), p.1105-1110.
- 13 N.A. Nazarbayev, V.S. Shkolnik, E.G. Batyrbekov and et al., Scientific, Technical and Engineering Work to Ensure the Safety of the Former Semipalatinsk Vol.3, (Kurchatov, 2016), p. 320-356. (in Russ).
- 14 V.V. Baklanov, V.S. Zhdanov, Ye.V. Malysheva, I.M. Kukushkin, V.I. Ignashev, M.I. Kukushkin, A.V. Mikisha and V.V. Zverev, NNC RK Bulletin, 1, 66-76, (2009). (in Russ).
- 15 V. Zhdanov, OECD Workshop on Ex-Vessel Debris Coolability (Karlsruhe, 15-18 November, 1999), 8 p.
- 16 ANSYS Fluent Tutorial Guide (Southpointe, 2013), 1034 p.
- 17 V. Zhdanov et al., Proc. of ICAPP 2011 (Nice, 2-5 May, 2011), pp.1300-1308.
- 18 L.I. Ivanova, L.S. Grobova, B.A. Sokunov, S.F. Sarapulov, Induction crucible furnaces (Yekaterinburg: USTU, 2002), 87 p. (in Russ).
- 19 K.O. Toleubekov, A.S. Khazhidinov and A.S. Akaev, NNC RK Bulletin, 1, 9-14 (2021). (in Russ).
- 20 K.M. Ramazanova, V.A. Zuev, D.A. Ganovichev, A.S. Khazhidinov and A.S. Akayev, NNC RK Bulletin, 3, 134-139 (2016). (in Russ).
- 21 V.G. Asmolov, V.N. Zagryazkin, E.V. Astakhova, V.Yu. Vishnevsky, E.K. Dyakov, A.Yu. Kotov and V.M. Repnikov, High Temperature, 41(5), 714-719 (2003). (in Russ).
- 22 I.V. Poznyak, A.N. Shatunov and A.Y. Pechenkov, Proceedings of Saint Petersburg Electrotechnical University, 10, 39-45 (2008). (in Russ).
- 23 <https://istc.int/ru/project/DA8802253C138C29C3257052005303CF> «ICTS project #K-1265 INVECOR»,
- 24 V.V. Baklanov, Dissertation for the degree of Candidate of Technical Sciences, Yurga, 2016, 173 p. (in Russ).
- 25 V. Chirkin, Thermophysical properties of materials of nuclear engineering (Moscow: Atomizdat, 1968), 356 p. (in Russ).
- 26 M.F. Zhukov Electric arc gas heaters (plasmotrons) (Moscow: Nauka, 1973), 232 p. (in Russ).
- 27 M.K. Bekmuddin, M.K. Skakov, V.V. Baklanov, A.V. Gradoboyev and A.S. Akaev, Eurasian Physical Technical Journal, 18(3), 65-70 (2021).

МАЗМҰНЫ – CONTENTS – СОДЕРЖАНИЕ

1-Бөлім Теориялық физика. Ядро және элементар бөлшектер физикасы. Астрофизика	Section 1 Theoretical Physics. Nuclear and Elementary Particle Physics. Astrophysics	Раздел 1 Теоретическая физика. Физика ядра и элементарных частиц. Астрофизика
<i>Dzhunushaliyev V., Folomeev V., Abdykaliyeva A., Khussainova S., Temirova A.</i> Mass gap for a monopole interacting with different nonlinear spinor fields 4		
<i>Бимуханов А.Н., Алдонгаров А.А.</i> Теоретическое исследование свойств переноса заряда комплекса Si(DPP) ₂ 10		
<i>Мырзакулова Ш.А., Разина О.В., Мырзакулов Н.А., Алтайбаева А.Б.</i> Инфляция медленного скатывания в модели <i>k</i> -эссенции с периодической функцией скалярного поля 19		
2-Бөлім Плазма физикасы	Section 2 Plasma Physics	Раздел 2 Физика плазмы
<i>Архипов Ю.В., Ашикбаева А.Б., Аскарулы А., Давлетов А.Е., Еркин А.Б.</i> Исследование динамического структурного фактора бинарных ионных смесей 29		
<i>Tazhen A.B., Dosbolayev M.K., Ramazanov T.S.</i> Pulsed plasma flow diagnostics 35		
3-Бөлім Конденсирленген күй физикасы және материалтану проблемалары. Наногылым	Section 3 Condensed Matter Physics and Materials Science Problems. Nanoscience	Раздел 3 Физика конденсированного состояния и проблемы материаловедения. Нанонаука
<i>Заурбекова Ж.А., Блынский П.А., Шаймерденов А.А., Чихрай Е.В., Әскербекев С.Қ., Төленова А.У., Кенжина И.Е., Бушнев П.А.</i> SiC қаптамаcы бар ЖТГР графитінің созылмалы коррозиясы 41		
<i>Zhumazhanova A., Giniyatova Sh., Mutali A., Ibrayeva A., Skuratov V., Dauletbekova A., Korneeva E., Akilbekov A., Zdorovets M.</i> Piezospectroscopic analysis of mechanical stresses in Si ₃ N ₄ and AlN irradiated with high-energy bismuth ions 53		
<i>Кедрук Е.Ю., Айтжанов М.Б., Гриценко Л.В., Абдуллин Х.А.</i> Использование оксида цинка для разложения органических соединений 60		
<i>Золотаренко Ол.Д., Рудакова О.П., Золотаренко Ан.Д., Щур Д.В., Гаврилюк Н.А., Картель Н.Т., Золотаренко О.Д., Машира В.А.</i> Атомы внедрения в окта- и тетраэдрических междоузлиях оцк кристаллов со свободной поверхностью 68		
<i>Bugybay Zh.T., Aitkulov M.T., Beisenova E.E., Akhanov A.M.</i> Application of the neutron radiography method to study the migration of lithium ions in electric batteries during discharge 78		
<i>Houbi A., Atassi Y., Zharmenov A.A., Bagasharova Zh.T., Myrzaliyeva S.K., Kadyrakunov K.B., Karibayev B.A.</i> Microwave absorption and electromagnetic interference shielding properties of carbon black/MnNiZn ferrite nanocomposites-filled paraffin wax in the frequency range (8.8–12 GHz) 85		
4 Бөлім Жылу физикасы және теориялық жылу техникасы	Section 4 Thermophysics and Theoretical Heat Engineering	Раздел 4 Теплофизика и теоретическая теплотехника
<i>Toleubekov K.O., Baklanov V.V., Akayev A.S., Bekmoldin M.K.</i> Modeling the process of decay heat imitation in the corium at the «LAVA-B» facility 97		
107		