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

№3 (78)

Алматы «Қазақ университеті» 2021

ISSN 1563-0315; eISSN 2663-2276



04.05.2017 ж. Қазақстан Республикасының Ақпарат және коммуникация министрлігінде тіркелген

ФИЗИКА СЕРИЯСЫ №3 (78) қыркүйек

ХАБАРШ

Куәлік № 14498-Ж

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

ЖАУАПТЫ ХАТШЫ Иманбаева А.К., ф.-м.ғ.к. (Қазақстан)

Телефон: +7(727) 377-33-46 E-mail: 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) Аскарова Ә.С., ф.-м.ғ.д., профессор (Қазақстан) Буртебаев Н., ф.-м.ғ.д., профессор (Қазақстан) Алдияров А.У., ф.-м.ғ.д., профессор (Қазақстан) Жаңабаев З.Ж., ф.-м.ғ.д., профессор (Қазақстан) Косов В.Н., ф.-м.ғ.д., профессор (Қазақстан) Буфенди Лайфа, профессор (Франция) Иващук В.Д., ф.-м.ғ.д., профессор (Ресей) Ишицука Эцуо, доктор (Жапония) Лунарска Элина, профессор (Польша) Сафарик П., доктор (Чехия) Тимошенко В.Ю., ф.-м.ғ.д., профессор (Ресей) Кеведо Эрнандо, профессор (Мексика)

ТЕХНИКАЛЫҚ ХАТШЫ Дьячков В.В., ф.-м.ғ.к. (Қазақстан)

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







российский индекс научного цитирования Science Index



Directory of Research Journal Indexing



Жоба менеджері Гульмира Шаккозова Телефон: +7 701 724 2911 E-mail: Gulmira.Shakkozova@kaznu.kz

Редакторлары: Гульмира Бекбердиева Агила Хасанқызы

Компьютерде беттеген Айгул Алдашева

ИБ № 14868

Пішімі 60х84 ¹/₈. Көлемі 7,8 б.т. Тапсырыс № 8405. Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университетінің «Қазақ университеті» баспа үйі. 050040, Алматы қаласы, әл-Фараби даңғылы, 71. «Қазақ университеті» баспа үйінің баспаханасында басылды.

© Әл-Фараби атындағы ҚазҰУ, 2021

1-бөлім

ТЕОРИЯЛЫҚ ФИЗИКА. ЯДРО ЖӘНЕ ЭЛЕМЕНТАР БӨЛШЕКТЕР ФИЗИКАСЫ. АСТРОФИЗИКА

Section 1

THEORETICAL PHYSICS. NUCLEAR AND ELEMENTARY PARTICLE PHYSICS. ASTROPHYSICS

Раздел 1

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА. ФИЗИКА ЯДРА И ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ. АСТРОФИЗИКА МРНТИ 29.05.23

Ж. Тюлемисов^{*}, А.Н. Исадыков^(D), А.К. Бекбаев^(D), Д.Т. Азнабаев^(D), К. Нурлан^(D)

Институт ядерной физики, Казахстан, г. Алматы *e-mail: zhomart161@mail.ru

РАСЧЕТ РАСПАДОВ ДВАЖДЫ ОЧАРОВАННЫХ БАРИОНОВ

Авторами статьи вычислен подкласс четырех нелептонных двух частичных слабых распадов дважды очарованных барионов Ξ_{cc}^{++} в основном состоянии. Нелептонные распады могут быть разделены на две группы: факторизуемые и нефакторизуемые распады. Первый вид можно с легкостью вычислять из первичных соображений. Следовательно, они хорошо подходят для понимания слабых и сильных сторон любой модели. Внимание было сфокусировано в первую очередь на слабых двух частичных нелептонных распадах, состоящих только из факторизуемых вкладов, которые исключают вклад от W-бозона. Здесь используется ковариантная модель кварков, ранее разработанная авторами статьи, для вычисления различных спиральных амплитуд, которые описывают динамику перехода, индуцированного Кабиббо-разрешенными эффективными токами. Достижение ССОМ состоит в том, что только изменением размерного параметра Л можно описать все древовидные диаграммы нелептонного распада. Затем проведено вычисление ширины распада. Ширины, бренчинги и спиральные амплитуды вычислялись с использованием безразмерных инвариантных форм-факторов. Были проведены вычисления лептонных констант распада скалярных и векторных мезонов, которые хорошо согласуются с экспериментальными данными. На данный момент нет экспериментальных данных для распадов, приведенных в данной статье, поэтому мы ждем новых экспериментов в секторе тяжелых барионов.

Ключевые слова: ковариантная модель кварков, нелептонные слабые распады, физика тяжелых барионов.

Zh.Zh. Tyulemissov^{*}, A.N. Issadykov, A.K. Bekbaev, D.T. Aznabaev, K. Nurlan Institute of Nuclear Physics, Kazakhstan, Almaty

*e-mail: zhomart161@mail.ru

Calculation of doubly heavy baryons decay

We calculated a subclass of four nonleptonic two-body weak decays of the double charm baryon ground states Ξ_{cc}^{++} . Nonleptonic decays can be divided into two group: factorizable and nonfactorizable decays. The first one can be easily calculated from first principles. Therefore, its good example understands all pros and cons of a model. We focused on a weak two-body nonleptonic decay consists only from the factorizing contribution precluding a contamination from W-exchange. We use the covariant confined quark model previously developed by us to calculate the various helicity amplitudes which describe the dynamics of the transition induced by the Cabibbo-favored effective currents. Achievement of CCQM is that only size parameter Λ varying can describe all tree diagrams of nonleptonic decay. We then proceed to calculate the rates of the decay. The rates, branching ratios and helicity amplitude were calculated using dimensionless invariant form factors. Also, we calculated leptonic constant for scalar and vector mesons which has good agreement with experimental data. There isn't any experimental data about the decay so we waiting for new experimental observation in the heavy baryon sector.

Key word: covariant confined quark model, nonleptonic weak decays, heavy baryons physics.

Ж. Тюлемисов*, А.Н. Исадыков, А.К. Бекбаев, Д.Т. Азнабаев, К. Нурлан

Ядролық физика институты, Қазақстан, Алматы қ. *e-mail: zhomart161@mail.ru

Екі рет ауыр барионның ыдырауын есептеу

Негізгі күйдегі екі ретті сиқырланған сс кваркты Ξ_{cc}+ бариондарының екі бөлшекті лептондардың қатысуынсыз өтетін төрт әлсіз ыдыраулары есептелінген. Лептондардың қатысуынсыз өтетін ыдырауларды екі топқа бөлуге болады: факторизацияланатын және факторизацияланбайтын ыдыраулар. Бірінші топты оңай есептеуге болады. Сол себепті ол ыдыраулар кез келген модельдің күшті және әлсіз жақтарын түсінуге өте ыңғайлы. Біз тек Wбозонның және лептондардың қатысуынсыз өтетін факторизацияланатын екі бөлшекті әлсіз ыдырауға ден қойдық. Біз Кабиббо теориясы бойынша рұқсат етілген тиімді токтармен индукцияланған ауысу динамикасын сипаттайтын, әртүрлі спиральды амплитудаларды есептеу үшін құрылған ковариантты кварк моделін қолданамыз. А өлшемді параметрін өзгерту арқылы лептондық емес ыдыраулардың барлық ағаш сызбаларын сипаттау ССQМ (ковариантты шектелген кварк моделі) жетістігі болып табылады. Содан кейін біз ыдырау ықтималдықтарын есептедік. Ыдырау ықтималдықтары, тармақталуы және спираль амплитудасы өлшемсіз инварианттық форм-факторларды қолдану арқылы есептелді. Сондай-ақ, біз тәжірибелік мәндермен жақсы сәйкесетін үйлесетін скаляр және вектор мезондардың лептондық ыдырау константаларын есептедік. Қазіргі уақытта бұл мақалада келтірілген ыдырауларға арналған тәжірибелік мәліметтер жоқ, сондықтан біз ауыр бариондар секторында жаңа эксперименттерді кутеміз.

Түйін сөздер: ковариантты кварк моделі, лептонсыз әлсіз ыдырауы, ауыр бариондардың физикасы.

Введение

Четыре года назад коллаборация LHCb сообщила об открытии дважды тяжелого очарованного состояния Ξ_{cc}^{++} [1]. Данное состояние было обнаружено в иваниантном массовом спектре конечной частицы ($\Lambda_c^+ K^- \pi^+ \pi^+$), где Λ_c^+ барион был восстановлен в моде распала $pK^-\pi^+$. Масса нового состояния равна $3621.40 \pm 0.72 \pm 0.14 \pm 0.27$ МэВ. Год спустя коллаборация LHCb обнаружила данную частицу в распаде $\Xi_{cc}^{++} \rightarrow \Xi_c^+ + \pi^+$ с массой $3620.6 \pm 1.5(\text{стат}) \pm 0.4(\text{сист}) \pm 0.3(\Xi_c^+)$ МэВ [2]. Измереное время жизни Ξ_{cc}^{++} было равно $\tau(\Xi_{cc}^{++}) = 0.256 + 0.024 - 0.022(\text{стат}) \pm 0.014(\text{сист})$ псек [3].

Средневзвешенное значение двух измерений массы $m_{\Xi_{cc}^{++}} = 3621 \pm 1.1 \pm 0.3 \pm 0.3$ МэВ очень близко в значению 3610 МэВ, которое было предсказано в работе [4] в рамках модели одно-глюонного обмена de Rujula et al. [5] с членом спин-спинового взаимодействия Брейта-Ферми. Примечательно, что Ebert et al. предсказали 3620 МэВ для Ξ_{cc}^{++} с использованием релятивисткой потенциальной кварк-дикварковой модели [6]. В работе [7] мы интерпретировали новое дважды очарованное состояние обнаруженное в массовом распределении ($\Lambda_c^+ K^- \pi^+ \pi^+$) как результат цепочки распадов $\Xi_{cc}^{++} \rightarrow \Sigma_c^{++} (2455; \frac{1}{2^+})$ (\rightarrow

 $\Lambda_c^+\pi^+$) + \overline{K}^{*0} ($\rightarrow K^-\pi^+$). В данной работе мы расширили анализ [7] в двух направлениях. Воперых, мы рассматриваем возможность того, что первая ступень в цепочке распадов состоит из распада $\Xi_{cc}^{++} \rightarrow \Sigma_{c}^{++} (2455; 3/2^{+}) (\rightarrow \Lambda_{c}^{+} \pi^{+}) + \overline{K}^{*0}$, где состояние $\Sigma_c^{++}(2455; 3/2^+)$ является тяжелокварковым симметричным партнером $\Sigma_c^{++}(2455; 1/2^+)$ со спином 3/2. Действительно, в всем выступлении на семинаре в ЦЕРН [8] Zhang (коллаборация LHCb) покзаал на диаграмме инвариантной массы для связанной системы ($\Lambda_c \pi^+$) в котором пик для $m(\Lambda_c \pi^+)$ лежит между двумя состояниями $\Sigma_c^{++}(2455; 1/2^+)$ и $\Sigma_{c}^{++}(2455; 3/2^{+})$. Во-вторых, мы предоставляем результаты для подкласса Кабиббо-разрешенным нелептонных двухчастичных распадов, еще не идентифицированного основного состояния бариона двойного очарования Ξ_{cc}^+ (3610) с квантовыми числами $J^P = 1/2^+$, где значение массы снова взято из расчет [4].

Физика двойного тяжелого очарования и прелестных барионов (спектр масс и свойства распада) изучалась ранее в ряде работ [4–7], [9]-[33]. Мы представили подробный анализ эксклюзивных распадов двойных тяжелых барионов с использованием нескольких версий ковариантных кварковых моделей в работах [7, 9, 11]. Двойные распады тяжелых барионов и их магнитные моменты рассматривались нами в [9], где мы провели всестороннее исследование полулептонных и радиационных распадов двойных тяжелых барионов с использованием ковариантной кварковой модели без реализации кваркового конфайнмента. Версия ковариантной кварковой модели, использованная в [9], была улучшена за счет эффективного включения кваркового ограничения [34]. В частности, в работе [7] мы интерпретировали барион Ξ_{cc}^{++} обнаруженный коллаборацией LHCb в инвариантно-массовом распределении набор конечных частиц ($\Lambda_c^+ K^- \pi^+ \pi^+$) появляется в результате цепочки распада $\Xi_{cc}^{++} \rightarrow \Sigma_{c}^{++} (\rightarrow \Lambda_{c}^{+} \pi^{+}) +$ $+\overline{K}^{*0}(\rightarrow K^{-}\pi^{+})$. Нелептонный распад $\Xi_{cc}^{++} \rightarrow$ $\rightarrow \Sigma_{c}^{++} + \overline{K}^{*0}$ относится к классу факторизуемых распадов, т.е. распадов, исключающих вклад от внутреннего обмена W-бозоном. В качестве побочного продукта нашего исследования мы также проанализировали нелептонную моду с \overline{K}^{0} в конечном состоянии. В работе [10] мы предложили новый метод оценки нефакторизующих (трехкварковых петель) диаграмм, образуемых обменом W-бозоном и участвующих в нелептонных двух-частичных распадах дважды очарованных барионов Ξ_{cc}^{++} и Ω_{cc}^{+} . Вклады обмена W-бозона появляются в дополнении к фаторизуемым древесным диаграммам и, в общем случае, они не подавлены. В работе [11] мы рассмотрели новые идеи в теоретическом описании нелептонных распадов дважды очарованных барионов. В данной статье мы расширяем наш анализ полулептонных распадов барионов с двойным очарованием, начатый в [9], путем включения всех факторизуемых мод для обоих типов слабых переходов - полулептонных и нелептонных с использованием обновленной теоретической основы - модели ССОМ. Отметим, что в нашей статье [9] мы использовали значения масс для массы дважды очарованных барионов $\Xi_{cc}^{++}=3.61$ ГеВ, которые отличаются от обновленных значений масс, используемых в настоящей статье (Ξ_{cc}^{++} = 3.6206 ГеВ [35]). При сравнении соответствующей полулептонной ширины в [9] с той, что в настоящей статье, необходимо принять во внимание измененные значения массы, что приводит к подавлению нашего результата 2001 года в ~ 1.6 раза, что в основном носит кинематический характер.

Наша статья построена следующим образом. Сначала мы обсудим топологии распадов нелептонных двухчастичных распадов основного состояния дважды очарованного бариона. Ξ_{cc}^{++} . Из множества возможных распадов мы

выделяем 4 распада, которые происходят только за счет факторизованных вкладов. Затем мы описываем материал о спиновой кинематике распадов. Определим инвариантные формфакторы и спиральные амплитуды. Запишем также формулы для полулептонных и нелептонных ширин. Также мы перечисляем набор локальных интерполирующих трехкварковых токов с правильными квантовыми числами барионных состояний, которые они описывают. Нелокальные версии интерполирующих токов входят в расчет различных формфакторов переходов в нашей ковариантной модели кварка (ССОМ). Мы также даем краткое описание основных особенностей нашего расчета в рамках ССОМ. Наконец, мы представляем наши численные результаты для нелептонных ширин и бренчингов.

Метод исследования

Нелептонные распады дважды тяжелых очарованных барионов

Распад $\Xi_{cc}^{++} \rightarrow \Sigma_{c}^{++} + P(V)$ относится к топологии которая называется древовидной диаграммой. Для заряженного излучения цветовой фактор аромата дается линейной комбинацией коэффициентов Вильсона ($C_2 + \xi C_1$), где $\xi = 1/N_c$, тогда как для нейтрального излучения получим ($C_1 + \xi C_2$). Мы взяли $C_1 = -0.51$ и $C_2 = 1.20$ из работы. [38]. Мы используем предел больших N_c для цветных факторов и аромата. Для диаграмм типа обмена W-бозоном, которые не рассматриваются в данной статье цветовой фактор имеет вид C2 - C1.

Матричный элемент эксклюзивного распада $B_1(p_1, \lambda_1) \rightarrow B_2(p_2, \lambda_2) + M(q, \lambda_M)$ определяется через ($p_1 = p_2 + q$)

$$\begin{split} M(B_1 \to B_2 + M) &= \\ &= \frac{G_F}{\sqrt{2}} V_{ij} V_{kl}^* C_{eff} f_M M_M \langle B_2 \big| \bar{q}_2 O_\mu q_1 \big| B_1 \rangle \epsilon^{\dagger \mu} (\lambda_M), \end{split}$$

где М = V и М = Р – это случай векторных и псевдоскалярных мезонов, такие что M_M и f_M , соответствующие массы M_V , M_P и константы лептонного распада f_V , f_P . Струна Дирака O_μ определяется как $O_\mu = \gamma_\mu (1 - \gamma_5)$. V_{ij} – это матричные элементы матрицы Кабиббо-Кабояши-Маскавы (СКМ): Vud = 0.97420 и Vcs = 0.997. C_{eff} – это комбинация коэффициентов Вильсона вида ($C_2 + \xi C_1$), где $\xi = 1/N_c$, а N_c – это число цветов, или вида ($C_1 + \xi C_2$) для нейтрального случая. Мы использовали $C_1 = -0.51$ и $C_2 = 1.20$

при µ = m_c = 1.3 ГеВ согласно работе [38]. Мы используем предел больших N_c для цветовых факторов. Всем известно, что нефакторизуемый вклад происходит из одноглюонного обмена, который может быть важным для описания нелептонных распадов. В качестве примера, вспомним хорошо известный распад $B \rightarrow I/\psi + K$, который пропорционален коэффициенту $a_2 = C_1 + \xi C_2$ и, который должен быть равен 0 в случае $N_c = 3$. В данном случае явная факторизация точно не описывает эксперимент. Обсуждение И определение нефакторизуемых поправок к коэффициенту a2 активно ведется в литературе с использованием различных методов. Однако, насколько нам известно, до сих пор не существует

четко установленной схемы, в которой нефакторизуемые вклады могли бы учитываться самосогласованным образом. Поэтому мы используем феноменологическое и простое предположение в наших расчетах для нелептонных распадов как тяжелых мезонов, так и барионов, что цветовой фактор $\xi = 1/N_c$, появляющийся в комбинации коэффициентов Вильсона, равен 0. Это предположение широко используется в литературе и хорошо оправдывается при сравнении с экспериментальными данными в мезонном секторе. Адронный матричный элемент $\langle B_2 | \bar{q}_2 O_\mu q_1 | B_1 \rangle$ может быть описан в шестью членами $(1/2^+ \rightarrow 1/2^+)$ безразмерных инвариантных фор-факторов $F_i^{V/A}(q^2)$. Получим

$$\langle B_2 | \bar{q}_2 \gamma_\mu q_1 | B_1 \rangle = \bar{u}(p_2, s_2) \left[\gamma_\mu F_1^V(q^2) - i\sigma_{\mu\nu} \frac{q_\nu}{M_1} F_2^V(q^2) + \frac{q_\nu}{M_1} F_3^V(q^2) \right] u(p_1, s_1),$$

$$\langle B_2 | \bar{q}_2 \gamma_\mu \gamma_5 q_1 | B_1 \rangle = \bar{u}(p_2, s_2) \left[\gamma_\mu F_1^A(q^2) - i\sigma_{\mu\nu} \frac{q_\nu}{M_1} F_2^A(q^2) + \frac{q_\nu}{M_1} F_3^A(q^2) \right] \gamma_5 u(p_1, s_1)$$

где $\sigma_{\mu\nu} = (i/2)(\gamma_{\mu}\gamma_{\nu} - \gamma_{\nu}\gamma_{\mu})$, а все γ -матрицы, матрицы представления Бьёркена-Дрелла.

Результаты и обсуждение

Результаты ковариантного динамического расчета, как в данном случае, обычно получают в терминах инвариантных формфакторов, определенных выше. Для удобства запишем набор инвариантных форм-факторов через набор спиральных амплитуд, где два набора линейно связаны. Поэтому мы выражаем векторную и аксиальную спиральные амплитуды $H_{\lambda_2\lambda_M}^{V/A}$ через инвариантные форм-факторы $F_i^{V/A}$, где $\lambda_M = t, \pm 1, 0, a$ $\lambda_2 = \pm 1/2 -$ это спиральные компоненты мезона M (M = P, V) и бариона B_2 , соответственно. Вычислим выражение вида

$$H_{\lambda_2\lambda_M} = \langle B_2(p_2,\lambda_2) \big| \bar{q}_2 O_\mu q_1 \big| B_1(p_1,\lambda_1) \rangle \epsilon^{\dagger\mu}(\lambda_M) = H^V_{\lambda_2\lambda_M} - H^A_{\lambda_2\lambda_M},$$

где было произведено разделение спиральных амплитуд на векторную и аксиальную части. Для распада с усилением цвета оператор $\bar{q}_2 O_\mu q_1$ описывает ток заряженного перехода, тогда как распад с подавлением цвета, $\bar{q}_2 O_\mu q_1$ описывает ток нейтрального перехода. Мы работаем в системе покоя бариона B_1 с барионом B_2 движущимся в положительном направлении оси z: $p_1 = (M_1, \vec{0}), p_2 = (E_2, 0, 0, |p_2|)$ и $q = (q_0, 0, 0, -|p_2|)$. Спиральности трех частиц связаны соотношением $\lambda_1 = \lambda_2 - \lambda_M$. Мы использовали обозначение $\lambda_P = \lambda_t = 0$ для скалярного вклада (J = 0), чтобы отличить спиральность от $\lambda_V = 0$ используемого для продольной компоненты векторного мезона с квантовым наполнением J = 1. Соотношения связывающие спиральные амплитуды и инвариантные форм-факторы для перехода $1/2^+ \rightarrow 1/2^+$ имеют вид: $H^V_{-\lambda_2,-\lambda_M} = +H^V_{\lambda_2,\lambda_M}$ и $H^A_{-\lambda_2,-\lambda_M} = -H^A_{\lambda_2,\lambda_M}$.

$$\begin{split} H_{\frac{1}{2}t}^{V} &= \sqrt{Q_{+}/q^{2}} \left(F_{1}^{V}M_{-} + F_{3}^{V}\frac{q^{2}}{M_{1}} \right), \qquad H_{\frac{1}{2}t}^{A} &= \sqrt{Q_{-}/q^{2}} \left(F_{1}^{A}M_{+} - F_{3}^{A}\frac{q^{2}}{M_{1}} \right), \\ H_{\frac{1}{2}0}^{V} &= \sqrt{Q_{-}/q^{2}} \left(F_{1}^{V}M_{+} + F_{2}^{V}\frac{q^{2}}{M_{1}} \right), \qquad H_{\frac{1}{2}0}^{A} &= \sqrt{Q_{+}/q^{2}} \left(F_{1}^{A}M_{-} - F_{2}^{A}\frac{q^{2}}{M_{1}} \right), \end{split}$$

7

$$H_{\frac{1}{2}0}^{V} = \sqrt{2Q_{-}} \left(-F_{1}^{V} - F_{2}^{V} \frac{M_{+}}{M_{1}} \right),$$

Использовались следующие аббревиатуры $M_{\pm} = M_1 \pm M_2, Q_{\pm} = M_{\pm}^2 - q^2$. Величина импульса дочернего бариона B_2 задается $|\mathbf{p2}| = \frac{\sqrt{Q^+Q^-}}{2M_1} = \lambda^{1/2} (M_1^2, M_2^2, q^2)/(2M_1)$. Для нелептонных распадов получим

$$\Gamma(B_1 \to B_2 + V) = \frac{G_F}{32\pi} \frac{|\mathbf{p}_2|}{M_1^2} |V_{ij}V_{kl}^*|^2 C_{eff}^2 f_V^2 M_V^2 H_V,$$

$$\Gamma(B_1 \to B_2 + P) = \frac{G_F}{32\pi} \frac{|\mathbf{p}_2|}{M_1^2} |V_{ij}V_{kl}^*|^2 C_{eff}^2 f_P^2 M_P^2 H_S,$$

где мы обозначаем сумму квадратов модулей спиральных амплитуд через H_V и H_S в соответствии с двумя случаями

Таблица 1 – Интерполяционные кварковые токи

$$H_{\frac{1}{2}0}^{A} = \sqrt{2Q_{+}} \left(-F_{1}^{A} + F_{2}^{A} \frac{M_{-}}{M_{1}} \right),$$

$$\frac{1}{2^+} \rightarrow \frac{1}{2^+} \colon H_V = \sum_{\lambda_2 = \pm \frac{1}{2}, \lambda_V = \pm 1, 0} |H_{\lambda_2, \lambda_V}|^2,$$
$$H_S = \sum_{\lambda_2 = \pm \frac{1}{2}} |H_{\lambda_2, \lambda_t}|^2.$$

Как описано во введении, мы используем ковариантную модель кварков (ССQМ) для расчета различных форм-факторов $F_i^{V,A}$ (q^2) для перехода $1/2^+ \rightarrow 1/2^+$, которые необходимы для вычисления спиральных амплитуд. Мы описываем взаимодействие барионов с составляющими их кварками с помощью нелокального расширения интерполяционных кварковых токов (подробнее см. [7, 10], [45]-[50]). В Таблице 1 мы перечислили необходимые интерполяционные токи

Барион	J^P	Интерполирующие токи	Macca(M ₃ B)
Ξ_{cc}^{++}	$1/2^{+}$	$\epsilon^{abc}\gamma^{\mu}\gamma_5 u^a c^b C \gamma_{\mu} c^c$	3620.6
Σ_c^{++}	$1/2^+$	$\epsilon^{abc}\gamma^{\mu}\gamma_5 c^a u^b C \gamma_{\mu} u^c$	2453.97

Три составляющих кварка рассматриваются как отдельные динамические объекты, которые распространяются с полностью ковариантными фермионными пропагаторами $S_q(k) = 1/(m_q - \hat{k})$ в двухпетлевой диаграмме Фейнмана, которая описывает индуцированным током переход между соответствующими барионами. Массы пропагаторов m_q представляют собой массы составляющих кварков, зафиксированные в предыдущих анализах множества адронных процессов в рамках нашего подхода (подробнее см. [46, 47]).

Помимо выбора интерполирующего тока и масс составляющих кварков, есть два параметра, которые описывают структуру бариона в ССQМ. Это константа связи бариона с составляющими его кварками g_B и размерный параметр Λ_B характеризующий размер нелокальности кварков в барионе. Константа связи g_B и размерный параметр Λ_B удовлетворяют условию связности Салама и Вайнберга [51, 52]. По аналогии мы

рассматриваем мезоны как связанные состояния кварка и антикварка, т.е. строим соответствующие нелокальные лагранжианы взаимодействия мезонов с составляющими их кварками (подробнее в работах [35, 49]).

Численные результаты

Обсудим ширины и бренчинги двух классов распадов

$$1/2^+ \rightarrow 1/2^+ + 0^-$$

 $1/2^+ \rightarrow 1/2^+ + 1^-$

Каждый из вышеупомянутых классов содержит четыре факторизуемых нелептонных двухчастичных распада. Таким образом, мы предлагаем всего четыре распада, которые имеют вид $\Xi_{cc}^{++} \rightarrow \Sigma_{c}^{++} + \overline{K}^{(*)0}, \Xi_{cc}^{++} \rightarrow \Sigma_{c}^{++} + \pi^{0}(\rho^{0})$. В таблице 2 перечислены ширины и бренчинги для всех четырех классов.

Распад	Γ[10 ⁻¹³ ΓeB]	B[%]
$\Xi_{cc}^{++} \to \Sigma_{cc}^{++} + \overline{K}^0$	0.32	1.25
$\Xi_{cc}^{++} \to \Sigma_{cc}^{++} + \pi^0$	0.054	0.21
$\Xi_{cc}^{++} \to \Sigma_{cc}^{++} + K^{*0}$	1.44	5.61
$\Xi_{cc}^{++} \to \Sigma_{cc}^{++} + \rho^0$	0.21	0.81

Таблица 2 – Кабиббо-разрешенные нелептонные двухчастичные распады дважды очарованных барионов

Заключение

Для нелептонных распадов мы проанализировали топологическую структуру их различных двухчастичных распадов в терминах двух Wэмиссионных (внешних и внутренних) или древовидных топологий и трех топологий W-обмена. Ширины, бренчинги и спиральные амплитуды вычислялись с использованием безразмерных инвариантных форм-факторов. Достижение ССОМ состоит в том, что только изменением размерного параметра Л можно описать все древовидные диаграммы нелептонного распада.

В этой статье мы предоставили первые предсказания для бренчингов распадов $\Xi_{cc}^{++} \rightarrow \Sigma_{cc}^{++} +$ $\overline{K}^{(*)0}, \Xi_{cc}^{++} \to \Sigma_{cc}^{++} + \pi^0(\rho^0).$

В следующей статье мы планируем также вычислить вклад W-обмена в Кабиббо-доминирующие нелептонные распады дважды очаро-

ванного бариона с предсказаниями для распадов, не рассмотренных в этой статье. Некоторые из этих распадов будут состоять из нефакторизуемого вклада W-обмена, который может быть рассчитан из первых принципов. Пока нет никаких теоретических работ, которые могли бы правильно предсказать нефакторизуемые распады.

Благодарности

Авторы выразжают благодарность Thomas Gutsche, Mikhail A. Ivanov, Jürgen Körner and Valery Lyubovitskij за их коллаборацию в результате, которой были получены результаты, обсуждаемые в данной статье.

Работа выполнена при финансовой поддержке Комитета науки Министерства образования и науки Республики Казахстан (грант №АР09057862).

Литература

1 Aaij R. et al. (LHCb Collaboration). Observation of the doubly charmed baryon Ξ_{cc}^{++} //Phys. Rev. Lett. – 2017. – Vol. 119. – Art. No 112001.

2 Aaij R. et al. (LHCb Collaboration). First Observation of the Doubly Charmed Baryon Decay $\Xi_{cc}^{++} \rightarrow \Xi_c^+ \pi^+$ //Phys. Rev. Lett. - 2018. - Vol.121. - Art. No 162002.

3 Aaij R. et al. (LHCb Collaboration). Measurement of the Lifetime of the Doubly Charmed Baryon Ξ_{cc}^{++} //Phys. Rev. Lett. – 2018. - Vol.121. - Art. No 052002.

4 Körner J.G., Krämer M., and Pirjol D. Heavy baryons // Prog. Part. Nucl. Phys. - 1994. - Vol.33. - P.787.

5 Rujula A.De, Georgi H., and Glashow S.L. Vector Model of the Weak Interactions //Phys. Rev. D. - 1975. - Vol.12. - P.3589. 6 Ebert D., Faustov R.N., Galkin V.O., and Martynenko A.P. Mass spectra of doubly heavy baryons in the relativistic quark model // Phys. Rev. D. - 2002. - Vol.66. - Art. No 014008.

7 Gutsche T., Ivanov M.A., Körner J.G., and Lyubovitskij V.E., Gutsche T., Ivanov M.A., Körner J.G., and Lyubovitskij V.E. //Phys. Rev. D. - 2017. - Vol. 96. - Art. No 054013. Decay chain information on the newly discovered double charm baryon state Ξ_{cc}^{++} //Phys. Rev. D. – 2017. – Vol.96. – Art.No 054013. 8 Zhang Y. Searches for baryons with multiple heavy quarks at LHCb //CERN Seminar. –

2017. https://indico.cern.ch/event/632400/

9 Faessler A., Gutsche T., Ivanov M.A., Körner J.G., and Lyubovitskij V.E. Semileptonic decays of double heavy baryons //Phys. Lett. B. - 2001. - Vol. 518. - P.55.

10 Branz T., Faessler A., Gutsche T., Ivanov M.A., Korner J.G., Lyubovitskij V.E., and Oexl B. Radiative decays of double heavy baryons in a relativistic constituent three-quark model including hyperfine mixing //Phys. Rev. D. - 2010. - Vol.81. - Art. No 114036.

11 Gutsche T., Ivanov M.A., Körner J.G., Lyubovitskij V.E., and Tyulemissov Z. Ab initio three-loop calculation of the W-exchange contribution to nonleptonic decays of double charm baryons //Phys. Rev. D. - 2019. - Vol.99. - Art. No 056013.

12 Gutsche T., Ivanov M.A., Körner J.G. and Lyubovitskij V.E. Novel ideas in nonleptonic decays of double heavy baryons //Particles. - 2019. - Vol.2. - P.339.

13 Fleck S. and Richard J.M. Baryons with double charm // Prog. Theor. Phys. - 1989. - Vol.82. - P.760.

14 Kiselev V.V., Likhoded A.K., and Onishchenko A.I. Lifetimes of doubly charmed baryons: Xi(cc)+ and Xi(cc)++ // Phys. Rev. D. - 1999. - Vol.60. - Art. No 014007.

15 Kiselev V.V., Berezhnoy A.V. and Likhoded A.K. Quark–Diquark Structure and Masses of Doubly Charmed Baryons //Phys. At. Nucl. – 2018. – Vol.81. – P.369.

16 Ebert D., Faustov R.N., Galkin V.O., and Martynenko A.P. Semileptonic decays of doubly heavy baryons in the relativistic quark model //Phys. Rev. D. - 2004. - Vol.70. - Art. No 014018. //Phys. Rev. D. - 2008. - Vol.77. - Art.No 079903(E).

17 Albertus C., Hernandez E., and Nieves J. Exclusive $c \rightarrow s$, d semileptonic decays of ground-state spin-1/2 and spin-3/2 doubly heavy cb baryons //Phys. Rev. D. – 2012. – Vol. 85. – Art. No 094035.

18 Flynn J.M. and Nieves J. //Phys. Rev. D. – 2007. – Vol.76. – Art.No 017502. Semileptonic bc to cc Baryon Decay and Heavy Quark Spin Symmetry //Phys. Rev. D. – 2008. – Vol.77. – Art. No 099901(E).

19 Chang C.H., Li T., Li X.Q., and Wang Y.M. Lifetime of doubly charmed baryons // Commun. Theor. Phys. - 2008. - Vol. 49. - P. 993.

20 Roberts W. and Pervin M. Hyperfine Mixing and the Semileptonic Decays of Double-Heavy Baryons in a Quark Model //Int. J. Mod. Phys. A - 2009. - Vol.24. - P.2401.

21 Karliner M. and Rosner J.L. Discovery of doubly-charmed Ξ_{cc} baryon implies a stable ($bb\bar{u}\bar{d}$) tetraquark //Phys. Rev. Lett. – 2017. – Vol.119. – Art. No 202001.

22 Guo Z.H. Prediction of exotic doubly charmed baryons within chiral effective field theory //Phys. Rev. D. -2017. - Vol.96. - Art. No 074004.

23 Xiao L.Y., Wang K.L., Lu Q.F., Zhong X.H., and Zhu S.L. Strong and radiative decays of the doubly charmed baryons //Phys. Rev. D. – 2017. – Vol.96. – Art. No 094005.

24 Lu Q.F., Wang K.L., Xiao L.Y., and Zhong X.H. Mass spectra and radiative transitions of doubly heavy baryons in a relativized quark model // Phys. Rev. D. - 2017. - Vol. 96. - Art. No 114006.

25 Sharma N. and Dhir R. Estimates of W-exchange contributions to Ξ_{cc} decays //Phys. Rev. D. – 2017. – Vol.96. – Art. No 113006.

26 Dhir R. and Sharma N. Weak decays of doubly heavy charm Ω_{cc}^+ baryon //Eur. Phys. J. C. – 2018. – Vol.78. – P.743.

27 Yu F.S., Jiang H.Y., Li R.H., Lu C.D., Wang W., and Zhao Z.X. Discovery Potentials of Doubly Charmed Baryons // Chin. Phys. C. - 2018. - Vol.42. - Art. No 051001.

28 Wang W., Xing Z.P., and Xu J. Weak Decays of Doubly Heavy Baryons: SU(3) Analysis // Eur. Phys. J. C. – 2017. – Vol.77. – P.800.

29 Shi Y.J., Wang W., Xing Y., and Xu J. Weak Decays of Doubly Heavy Baryons: Multi-body Decay Channels //Eur. Phys. J. C. – 2018. – Vol.78. – P. 56.

30 Cui E.L., Chen H.X., Chen W., Liu X., and Zhu S.L. Suggested search for doubly charmed baryons of $J^P = 3/2^+$ via their electromagnetic transitions //Phys. Rev. D. – 2018. – Vol.97. – Art. No 034018.

31 Wang W., Yu F.S., and Zhao Z.X. Weak decays of doubly heavy baryons: the $1/2 \rightarrow 1/2$ case //Eur. Phys. J. C. - 2017. - Vol. 77. - P. 781.

32 Hu X.H., Shen Y.L., Wang W., and Zhao Z.X. Weak decays of doubly heavy baryons: "decay constants" //Chin. Phys. C. – 2018. – Vol.42. – P. 123102.

33 Xing Z.P. and Zhao Z.X. Weak decays of doubly heavy baryons: the FCNC processes //Phys. Rev. D. -2018. -Vol.98. - Art. No 056002.

34 Shi Y.J., Xing Y., and Zhao Z.X. Light-cone sum rules analysis of $\Xi_{QQ'q} \rightarrow \Lambda_{Q'}$ weak decays //Eur. Phys. J. C. – 2019. – Vol. 79. – P. 501.

35 Branz T., Faessler A., Gutsche T., Ivanov M.A., Körner J.G., and Lyubovitskij V.E. Relativistic constituent quark model with infrared confinement // Phys. Rev. D. – 2010. – Vol.81. – P.034010.

36 Tanabashi M. et al. Review of Particle Physics. // Phys. Rev. D. - 2018. - Vol. 98. - Art.No 030001.

37 Leibovich A.K., Ligeti Z., Stewart I.W., and Wise M.B. Predictions for nonleptonic Lambda(b) and Theta(b) decays // Phys. Lett. B. - 2004. - Vol. 586. - P.337.

38 Buchalla G., Buras A.J., and Lautenbacher M.E. Weak decays beyond leading logarithms // Rev. Mod. Phys. - 1996. - Vol.68. - P. 1125.

39 Körner J.G. Octet behaviour of single-particle matrix elements $\langle B'|H(W)|B \rangle$ and $\langle M'|H(W)|M \rangle$ using a weak current current quark Hamiltonian // Nucl. Phys. B. – 1971. – Vol.25. – P. 282.

40 Pati J.C. and Woo C.H. Delta I = 1/2 rule with fermion quarks // Phys. Rev. D. - 1971. - Vol.3. - P. 2920.

41 Körner J.G., Kramer G., and Willrodt J. Weak Decays of Charmed Baryons // Z. Phys. C. - 1979. - Vol.2. - P.117.

42 Körner J.G. and Kramer M. Exclusive nonleptonic charm baryon decays // Z. Phys. C. - 1992. - Vol. 55. - P. 659.

43 Uppal T., Verma R.C., and Khanna M.P. Constituent quark model analysis of weak mesonic decays of charm baryons // Phys. Rev. D. – 1994. – Vol. 49. – P. 3417.

44 Fayyazuddin and Riazuddin, On the relative strength of W exchange and factorization contributions in hadronic decays of charmed baryons // Phys. Rev. D. – 1997. – Vol. 55. – P. 255. // Phys. Rev. D. – 1997. – Vol. 56. – P. 531(E).

45 Ivanov M.A., Körner J.G., Lyubovitskij V.E., and Rusetsky A.G. Exclusive nonleptonic decays of bottom and charm baryons in a relativistic three quark model: Evaluation of nonfactorizing diagrams // Phys. Rev. D. – 1998. – Vol.57. – P. 5632.

46 Gutsche T., Ivanov M.A., Körner J.G., Lyubovitskij V.E., and Santorelli P. Polarization effects in the cascade decay $\Lambda_b \rightarrow \Lambda(\rightarrow p\pi) + J/\psi(\rightarrow l^+l^-)$ in the covariant confined quark model //Phys. Rev. D. – 2013. – Vol.88. – Art. No 114018.

47 Gutsche T., Ivanov M.A., Körner J.G., Lyubovitskij V.E., Lyubushkin V.V., and Santorelli P. Theoretical description of the decays $\Lambda_b \rightarrow \Lambda^{(*)}\left(\frac{1^{\pm}}{2}, \frac{3^{\pm}}{2}\right) + J/\psi$ //Phys. Rev. D. – 2017. – Vol.96. – Art. No 013003.

48 Gutsche T., Ivanov M.A., Korner J.G., Lyubovitskij V.E., and Santorelli P. Semileptonic decays $\Lambda_c^+ \rightarrow \Lambda l^+ v_l (l = e, \mu)$ in the covariant quark model and comparison with the new absolute branching fraction measurements of Belle and BESIII //Phys. Rev. D. - 2016. - Vol. 93. - Art. No 034008.

49 Dubnicka S., Dubnickova A.Z., Ivanov M.A., and Liptaj A. Decays $B_s \rightarrow J/\psi + \eta$ and $B_s \rightarrow J/\psi + \eta'$ in the framework of covariant quark model // Phys. Rev. D. - 2013. - Vol.87. - Art. No 074021.

50 Ivanov M.A., Lyubovitskij V.E., Korner J.G., and Kroll P. Heavy baryon transitions in a relativistic three quark model //Phys. Rev. D. - 1997. - Vol.56. - P.348.

51 Salam A. Lagrangian theory of composite particles // Nuovo Cimento. - 1962. - Vol.25. - P. 224.

52 Weinberg S. Elementary particle theory of composite particles // Phys. Rev. - 1963. - Vol.130. - P. 776.

References

1 R. Aaij et al. (LHCb Collaboration), Phys. Rev. Lett. 119, 112001 (2017)

2 R. Aaij et al. (LHCb Collaboration), Phys. Rev. Lett. 121, 162002 (2018)

3 R. Aaij et al. (LHCb Collaboration), Phys. Rev. Lett. 121, 052002 (2018)

4 J. G. Körner, M. Kr"amer, and D. Pirjol, Prog. Part. Nucl. Phys. 33, 787 (1994)

5 A. De Rujula, H. Georgi, and S. L. Glashow, Phys. Rev. D 12, 3589 (1975).

6 D. Ebert, R.N. Faustov, V.O. Galkin, and A.P. Martynenko, Phys. Rev. D 66, 014008 (2002).

7 T. Gutsche, M.A. Ivanov, J.G. Körner, and V.E. Lyubovitskij, Phys. Rev. D 96, 054013 (2017).

8 Y. Zhang, CERN Seminar (2017), https://indico.cern.ch/event/632400/

9 A. Faessler, T. Gutsche, M.A. Ivanov, J.G. Körner, and V.E. Lyubovitskij, Phys. Lett. B 518, 55 (2001).

10 T. Branz, A. Faessler, T. Gutsche, M.A. Ivanov, J. . Korner, V. E. Lyubovitskij, and B. Oexl, Phys. Rev. D 81, 114036 (2010).

11 T. Gutsche, M.A. Ivanov, J.G. Körner, V.E. Lyubovitskij, and Z. Tyulemissov, Phys. Rev. D 99, 056013 (2019).

12 T. Gutsche, M.A. Ivanov, J.G. Körner and V.E. Lyubovitskij, Particles 2, 339 (2019).

13 S. Fleck and J.M. Richard, Prog. Theor. Phys. 82, 760 (1989).

14 V.V. Kiselev, A.K. Likhoded, and A.I. Onishchenko, Phys. Rev. D 60, 014007 (1999).

15 V.V. Kiselev, A.V. Berezhnoy and A.K. Likhoded, Phys. At. Nucl. 81, 369 (2018).

16 D. Ebert, R.N. Faustov, V.O. Galkin, and A.P. Martynenko, Phys. Rev. D 70, 014018 (2004), Phys. Rev. D 77, 079903(E) (2008).

17 C. Albertus, E. Hernandez, and J. Nieves, Phys. Rev. D 85, 094035 (2012).

18 J.M. Flynn and J. Nieves, Phys. Rev. D 76, 017502 (2007), Phys. Rev. D 77, 099901(E) (2008).

19 C.H. Chang, T. Li, X. Q. Li, and Y.M. Wang, Commun. Theor. Phys. 49, 993 (2008).

20 W. Roberts and M. Pervin, Int. J. Mod. Phys. A 24, 2401 (2009).

21 M. Karliner and J.L. Rosner, Phys. Rev. Lett. 119, 202001 (2017).

22 Z.H. Guo, Phys. Rev. D 96, 074004 (2017).

23 L.Y. Xiao, K.L. Wang, Q.F. Lu, X.H. Zhong, and S. L. Zhu, Phys. Rev. D 96, 094005 (2017).

24 Q.F. Lu, K.L. Wang, L. Y. Xiao, and X. H. Zhong, Phys. Rev. D 96, 114006 (2017).

25 N. Sharma and R. Dhir, Phys. Rev. D 96, 113006 (2017).

26 R. Dhir and N. Sharma, Eur. Phys. J. C 78, 743 (2018). 27 F.S. Yu, H.Y. Jiang, R.H. Li, C.D. Lu, W. Wang, and Z. X. Zhao, Chin. Phys. C 42, 051001 (2018).

28 W. Wang, Z.P. Xing, and J. Xu, Eur. Phys. J. C 77, 800 (2017).

29 Y.J. Shi, W. Wang, Y. Xing, and J. Xu, Eur. Phys. J. C 78, 56 (2018).

30 E.L. Cui, H.X. Chen, W. Chen, X. Liu, and S.L. Zhu, Phys. Rev. D 97, 034018 (2018).

31 W. Wang, F.S. Yu, and Z.X. Zhao, Eur. Phys. J. C 77, 781 (2017) arXiv:1707.02834.

32 X.H. Hu, Y.L. Shen, W. Wang, and Z.X. Zhao, Chin. Phys. C 42, 123102 (2018).

33 Z.P. Xing and Z.X. Zhao, Phys. Rev. D 98, 056002 (2018).

34 Y.J. Shi, Y. Xing, and Z.X. Zhao, Eur. Phys. J. C 79, 501 (2019).

35 T. Branz, A. Faessler, T. Gutsche, M.A. Ivanov, J.G. Körner, and V.E. Lyubovitskij, Phys. Rev. D 81, 034010 (2010).

36 M. Tanabashi et al., Phys. Rev. D 98, 030001 (2018).

37 A.K. Leibovich, Z. Ligeti, I. W. Stewart, and M. B. Wise, Phys. Lett. B 586, 337 (2004).

38 G. Buchalla, A.J. Buras, and M. E. Lautenbacher, Rev. Mod. Phys. 68, 1125 (1996).

39 J.G. Körner, Nucl. Phys. B25, 282 (1971).

40 J.C. Pati and C. H. Woo, Phys. Rev. D 3, 2920 (1971).

41 J.G. Körner, G. Kramer, and J. Willrodt, Z. Phys. C 2, 117 (1979).

42 J.G. Körner and M. Kr amer, Z. Phys. C 55, 659 (1992)

43 T. Uppal, R.C. Verma, and M.P. Khanna, Phys. Rev. D 49, 3417 (1994).

44 Fayyazuddin and Riazuddin, Phys. Rev. D 55, 255 (1997), Phys. Rev. D 56, 531(E) (1997).

45 M.A. Ivanov, J.G. Körner, V.E. Lyubovitskij, and A.G. Rusetsky; Phys. Rev. D 57, 5632 (1998).

46 T. Gutsche, M.A. Ivanov, J.G. Körner, V.E. Lyubovitskij, and P. Santorelli, Phys. Rev. D 88, 114018 (2013).

47 T. Gutsche, M.A. Ivanov, J.G. Körner, V.E. Lyubovitskij, V.V. Lyubushkin, and P. Santorelli, Phys. Rev. D 96, 013003 (2017)

48 T. Gutsche, M.A. Ivanov, J.G. Korner, V.E. Lyubovitskij, and P. Santorelli, Phys. Rev. D 93, 034008 (2016).

49 S. Dubnicka, A.Z. Dubnickova, M.A. Ivanov, and A. Liptaj, Phys. Rev. D 87, 074021 (2013).

50 M.A. Ivanov, V.E. Lyubovitskij, J. G. Korner, and P. Kroll, Phys. Rev. D 56, 348 (1997).

51 A. Salam, Nuovo Cimento 25, 224 (1962).

52 S. Weinberg, Phys. Rev. 130, 776 (1963).

2-бөлім ПЛАЗМА ФИЗИКАСЫ

Section 2 PLASMA PHYSICS

Раздел 2 ФИЗИКА ПЛАЗМЫ МРНТИ 29.27.00

https://doi.org/10.26577/RCPh.2021.v78.i3.02

М.К. Исанова^{1,2}* ^(D), С.К. Коданова^{1,2} ^(D), Н.Х. Бастыкова^{1,2} , А.И. Кенжебекова^{1,2}

¹Институт прикладных наук и информационных технологий, Казахстан, г. Алматы ²Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Казахстан, г. Алматы *e-mail: issanova@physics.kz

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА РАССЕЯНИЯ ЭЛЕКТРОНА НА ИОНЕ В ПЛАЗМЕ ИНЕРЦИОННОГО ТЕРМОЯДЕРНОГО СИНТЕЗА В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

В данной работе изучались процессы рассеяния электрона на ионе в плазме инерционного термоядерного синтеза в магнитном поле. Предложенная модель для исследования процессов рассеяния между заряженными частицами основана на решении уравнения движения в центральном поле с учетом внешнего магнитного поля, а также кулоновского логарифма, который определяется с помощью угла рассеяния при парном столкновении. Были исследованы столкновения между электроном и ионом, которые взаимодействуют посредством потенциала Юкава. Также был вычислен кулоновский логарифм в плотной плазме в магнитном поле. Проведено исследование влияние учета магнитного поля на углы рассеяния, сечение рассеяние и кулоновский логарифм. Из полученных результатов установлено, что учет магнитного поля привел к немонотонному изменению угла рассеяния и уменьшению сечения рассеяния при слабых взаимодействиях частиц. Также выявлено, что при больших значениях параметра взаимодействия β магнитное поле не влияет на значение кулоновского логарифма. Таким образом, полученные результаты позволяют изучить влияние учета магнитного поля на процессы рассеяния электрона на ионе в приближении парных столкновений во внешнем постоянном магнитном поле в плотной плазме.

Ключевые слова: плотная плазма, инерционный термоядерный синтез, магнитное поле, процесс рассеяния, кулоновский логарифм.

M.K. Issanova^{1,2*}, S.K. Kodanova^{1,2}, N.Kh. Bastykova^{1,2}, A.I. Kenzhebekova^{1,2}

¹Institute of Applied Sciences and Information Technologies, Kazakhstan, Almaty ²Al-Farabi Kazakh National university, Kazakhstan, Almaty *e-mail: issanova@physics.kz

Investigation of the scattering of electrons by ions in the plasma of inertial confinement fusion in a magnetic field

In this paper, the processes of electron-ion scattering in the plasma of inertial confinement fusion in a magnetic field were studied. The proposed model for studying the processes of scattering between charged particles is based on solving the equation of motion in a central field taking into account the external magnetic field, as well as the Coulomb logarithm, which is determined using the scattering angle in a pair collision. Collisions between an electron and an ion that interact via the Yukawa potential were investigated. Also, the Coulomb logarithm in a dense plasma in a magnetic field was calculated. The effect of taking into account the magnetic field on the scattering angles, the scattering cross-section and the Coulomb logarithm are studied. From the results obtained, it is established that taking into account the magnetic field led to a non-monotonic change in the scattering angle and a decrease in the scattering cross-section for weak particle interactions. It is also revealed that for large values of the interaction parameter β , the magnetic field does not affect the value of the Coulomb logarithm. Thus, the obtained results allow us to study the effect of taking into account the magnetic field on the processes of electron scattering on an ion in the approximation of pair collisions in an external constant magnetic field in a dense plasma.

Key words: Dense plasma, inertial confinement fusion, magnetic field, scattering process, Coulomb logarithm.

М.К. Исанова^{1,2}*, С.К. Коданова^{1,2}, Н.Х. Бастыкова^{1,2}, А.И. Кенжебекова^{1,2}

¹Қолданбалы ғылымдар және ақпараттық технологиялар институты, Қазақстан, Алматы қ. ²Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Қазақстан, Алматы қ. *e-mail: issanova@physics.kz

Магнит өрісіндегі инерциялық термоядролық синтез плазмасында электронның ионда шашырау процесін зерттеу

Бұл жұмыста магнит өрісіндегі инерциялық термоядролық синтездің плазмасындағы иондағы электронның шашырау процестері зерттелді. Юкава потенциалы арқылы өзара әрекеттесетін электрон мен ион арасындағы қақтығыстар зерттелді. Сондай-ақ, магнит өрісіндегі тығыз плазмадағы кулондық логарифм есептелді. Магнит өрісін есепке алудың шашырау бұрыштарына, шашырау қимасына және кулондық Логарифмге әсері зерттелді. Алынған нәтижелерден магнит өрісін есепке алу шашырау бұрышының монотонды емес өзгеруіне және бөлшектердің әлсіз өзара әрекеттесуі кезінде шашырау қимасының төмендеуіне әкелгені анықталды. Сондай-ақ, өзара әрекеттесу параметрінің β үлкен мәндерінде магнит өрісі Кулон логарифмінің мәніне әсер етпейтіні анықталды. Осылайша, алынған нәтижелер тығыз плазмадағы сыртқы тұрақты магнит өрісінде қосарланған соқтығысулар жақындаған кезде иондағы электронның шашырау процестеріне магнит өрісін есепке алудың әсерін зерттеуге мүмкіндік беретіні анықталды. Бұл жұмыста біздің алынған нәтижелер инерциялық термоядролық синтездің тығыз плазмасындағы соқтығысу процесінде магнит өрісін ескерудің әсері туралы пайдалы ақпарат береді. Бұл білім инерциялық термоядролық синтездің ең маңызды технологиялық мәселесін шешу үшін қажет болып табылады: оңтайлы мақсатты конструкция мен жүргізуші сипаттамаларын анықтау үшін.

Түйін сөздер: тығыз плазма, инерциялық термоядролық синтез, магнит өрісі, шашырау процесі, кулондық логарифм.

Введение

Особое место среди работ, посвященных различным аспектам проблем управляемого термоядерного синтеза, занимают исследования в области инерционного термоядерного синтеза (ИТС). Исследования последних лет показали, что энергетически намного выгоднее, если процесс сжатия мишени (дейтерий-тритиевой таблетки) происходит в достаточно сильном магнитном поле. Таким образом, для успешной реализации ИТС необходимо понимание физических свойств плотной плазмы в сильном внешнем магнитном поле. Определение оптимальной конструкции мишени и характеристик драйвера являются важнейшими задачами энергетики будущего - инерционного термоядерного синтеза.

Исследования, проведенные мировыми учеными в области инерционного термоядерного синтеза, являются одним из возможных решений, основанных на развитии и использовании альтернативных источников энергии в будущем [1-2]. Поэтому передовые технологии, основанные на использовании плазмы, в которых идет реакция синтеза, и инерционное удержание за счет магнитных полей и мощных источников нагрева, таких как лазеры и пучки тяжелых ионов, необходимы в отраслях энергетической промышленности.

Потеря энергии ионных пучков и процессы связанные с ними в магнитном поле является актуальной проблемой при реализации идеи управляемого термоядерного синтеза. Поскольку магнитное поле в известных термоядерных устройствах увеличивается, согласно [3-5], то парные столкновения заряженных частиц в магнитном поле могут влиять на нагрев и удержание плазмы. Поэтому необходимо изучать влияние магнитного поля на рассеяния частиц.

Существуют несколько подходов изучения столкновительных характеристик в магнитном поле. В работах [6] были проведены исследования кулоновского столкновения в намагниченной плазме. В результате выявлено, что магнитное поле приводит к замедлению переноса скорости в поперечном направлении, а в продольном направлении к возрастанию переноса скорости. В работе [7] для описания столкновительных процессов в термоядерных установках получена аналитическая формула Резерфорда в зависимости от магнитного поля (слабого), которая утверждает, что с увеличением магнитного поля уменьшается угол рассеяния электрона. В случае внешнего магнитного поля электронно-ионное рассеяние обусловлено суперпозицией циклотронного движения электронов и кулоновского столкновения без магнитного поля. Влияние циклотронного движения на угол рассеяния становится сильнее с увеличением магнитного поля. Были предложены методы исследования угла рассеяния в магнитном поле численными методами [8-11].

Данная работа направлена на исследование процессов рассеяния плотной неравновесной плазмы во внешнем магнитном поле. Было исследовано классическое электрон-ионное рассеяние, вычислен кулоновский логарифм в плотной плазме в магнитном поле.

Метод исследования

Теоретическая модель

В данной работе были исследованы процессы рассеяния заряженных частиц плотной плазмы в присутствии однородного магнитного поля.

Мы рассматриваем парное столкновение между двумя частицами с массой $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$, взаимодействующими через потенциал взаимодействия Юкавы $U(r) = -(U_0 / r) \exp(-r / \lambda), U_0 > 0$ [7].

Уравнение Ньютона во внешнем магнитном поле:

$$-e\vec{E} - e\vec{v} \times \vec{B} = m\frac{d^2\vec{r}}{dt^2}$$
(1)

где $E = e / 4\pi\varepsilon_0 r^2$ и \vec{B} – напряженность электрического и магнитного поля, соответственно. В полярной координате \vec{e}_r , \vec{e}_{ψ} – единичные векторы, т.е уравнение (8) можно записать таким образом:

$$\left(-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} + er\frac{d\psi}{dt}B \right) \vec{e}_r - e\frac{dr}{dt}B\vec{e}_{\psi} = m \left[\frac{d^2r}{dt^2} - r\left(\frac{d\psi}{dt}\right)^2 \right] \vec{e}_r +$$
(2)

$$+ m \left[2\frac{dr}{dt}\frac{d\psi}{dt} + r\frac{d^2\psi}{dt^2} \right] \vec{e}_{\psi}$$

Тогда уравнение (2) можно записать в направлениях \vec{e}_r , \vec{e}_{w} , соответственно

$$-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} + er\frac{d\psi}{dt}B = m\left[\frac{d^2r}{dt^2} - r\left(\frac{d\psi}{dt}\right)^2\right] (3)$$

$$-e\frac{dr}{dt}B = m\left[2\frac{dr}{dt}\frac{d\psi}{dt} + r\frac{d^2\psi}{dt^2}\right]$$
(4)

Интегрируя уравнение (4) по времени *t*, получим следующее:

$$r^{2}\left(\frac{d\psi}{dt} + \frac{eB}{2m}\right) = C_{1}$$
 (5)

где C₁ – постоянная. Из начального условия:

$$r_0^2 \frac{d\psi_0}{dt} = \upsilon_0 b ,$$

будем иметь,

$$C_1 = r_0^2 \left(\frac{d\psi_0}{dt} + \frac{eB}{2m} \right) = \upsilon_0 b + \frac{eBr_0^2}{2m},$$

тогда (5) в следующем виде:

$$\frac{d\psi}{dt} = -\frac{eB}{2m} + \frac{1}{r^2} \left(\upsilon_0 b + \frac{eBr_0^2}{2m} \right) \tag{6}$$

Поскольку сила Лоренца не вносит вклада в энергетический обмен, то закон сохранения энергии

$$\frac{1}{2}m\upsilon_0^2 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0} = \frac{1}{2}m\upsilon^2 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} , \quad (7)$$

где

$$\upsilon = \sqrt{\left(\frac{dr}{dt}\right)^2 + r^2 \left(\frac{d\psi}{dt}\right)^2} \quad . \tag{8}$$

Учитывая уравнения (7) в (8), имеем следующий вид

$$m\upsilon_0^2 - \frac{2e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0} + \frac{2e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} = m\left[\left(\frac{dr}{dt}\right)^2 + r^2\left(\frac{d\psi}{dt}\right)^2\right]$$
(9)

Выражение
$$\frac{dr}{dt}$$
 определяется как,

$$\left(\frac{dr}{dt}\right)^2 = v_0^2 - \frac{2e^2}{4\pi\varepsilon_0 mr_0} + \frac{2e^2}{4\pi\varepsilon_0 mr} - r^2 \left(\frac{d\psi}{dt}\right)^2$$
(10)

После подстановки (6) в (10), уравнение (10) преобразуется в следующий вид:

$$\left(\frac{dr}{dt}\right)^{2} = \upsilon_{0}^{2} - \frac{2e^{2}}{4\pi\varepsilon_{0}mr_{0}} + \frac{2e^{2}}{4\pi\varepsilon_{0}mr} - r^{2}\left[-\frac{eB}{2m} + \frac{1}{r^{2}}\left(\upsilon_{0}b + \frac{eBr_{0}^{2}}{2m}\right)\right]^{2}$$
(11)

Комбинируя (16) и (11), мы получаем дифференциальную форму уравнения траектории

$$\frac{d\psi}{dt} = \frac{\frac{\omega}{2\nu_0} + \frac{b}{r^2} - \frac{\omega r_0^2}{2\nu_0 r^2}}{\sqrt{1 + \frac{2b_0}{r_0} - \frac{2b_0}{r} - r^2 \left(\frac{\omega}{2\nu_0} + \frac{b}{r^2} - \frac{\omega r_0^2}{2\nu_0 r^2}\right)^2}},$$
(12)

где ω определяется как

$$\omega = -\frac{eB}{m}$$

Кулоновский логарифм определяется с помощью угла рассеяния при парном кулоновском столкновении. Вводя центр масс в процесс столкновения, кулоновский логарифм записывается в виде [12-14]:

$$\Lambda_{ei} = \frac{1}{b_{\perp}^2} \int_0^\infty \sin^2\left(\frac{\chi(\rho)}{2}\right) \rho d\rho, \qquad (13)$$

здесь $b_{\perp} = Z_{ion} e^2 / (2E_C)$, $E_C = \frac{1}{2} \mu_{ei} \upsilon^2$ – энер-

гия центра масс сталкивающихся частиц, U –

относительная скорость рассеянной пробной частицы [12-14].

Результаты и обсуждения

Исследования последних лет указывают на необходимость применения магнитного поля для улучшения эффективности передачи энергии от лазера к мишени инерционного термоядерного синтеза, и необходимость проведения исследований свойств плотной плазмы в магнитном поле. Во-первых, за счет магнитного поля, эффективность передачи энергии от лазера к мишени увеличивается в несколько раз (до семи) если приложенное магнитное поле больше сотни Тесла [15]. Во-вторых, при прямом сжатии таблетки лазерами, достаточно сильное внешнее магнитное поле позволяет лазерному излучению проникать в центральную область мишени [16]. В-третьих, внешнее магнитное поле позволяет уменьшить потери энергии за счет уменьшения утечки нагретых частиц плазмы в направлении перпендикулярном силовым линиям магнитного поля [17].

На рисунках 1-3 показаны углы рассеяния в зависимости от прицельного параметра для параметра взаимодействия $\beta = 0.01$, $\beta = 1$ и $\beta = 20$ при различных значениях внешнего магнитного поля. Следовательно, усиление магнитного поля приводит к уменьшению угла рассеяния при малых значениях прицельного параметра. Однако, при больших значениях прицельного параметра наблюдается увеличение угла рассеяния при больших значениях магнитного поля. Как видно из рисунка 4, уменьшение угла рассеяния отразилась в сечении рассеяния при слабом взаимодействии, когда $\beta < 1$.

На рисунке 5 приведены значения кулоновского логарифма в зависимости от параметра взаимодействия β при различных значениях внешнего магнитного поля. Из рисунков видно, что при низких параметрах взаимодействия β значение кулоновского логарифма без учета магнитного поля больше, чем при значениях магнитного поля $B=1\div 3T$. Тогда как, при больших значениях параметра взаимодействия β магнитное поле не влияет на значение кулоновского логарифма. Этот результат может быть объяснен тем, что увеличение магнитного поля приводит к уменьшению угла рассеяния при малых значениях прицельного параметра.



Рисунок 1 – Углы рассеяния в зависимости от прицельного параметра для параметра взаимодействия β = 1 при различных значениях внешнего магнитного поля



Рисунок 2 – Углы рассеяния в зависимости от прицельного параметра для параметра взаимодействия β = 20 при различных значениях внешнего магнитного поля



Рисунок 3 – Углы рассеяния в зависимости от прицельного параметра для параметра взаимодействия $\beta = 0.01$ при различных значениях внешнего магнитного поля



Рисунок 4 – Сечение рассеяния в зависимости от параметра взаимодействия β при различных значениях внешнего магнитного поля



Рисунок 5 – Кулоновский логарифм в зависимости от параметра взаимодействия β при различных значениях внешнего магнитного поля

Заключение

В данной работе были исследованы процессы рассеяния электрона на ионе в плотной плазме инерционного термоядерного синтеза в магнитном поле. Из полученных результатов выявлено, что учет магнитного поля привел к немонотонному изменению угла рассеяния и уменьшению сечения рассеяния при слабых взаимодействиях частиц. Также установлено, что при больших значениях параметра взаимодействия β магнитное поле не влияет на значение кулоновского логарифма.

Эти результаты дают полезную информацию о влиянии учета магнитного поля в процессах столкновении в плотной плазме инерционного термоядерного синтеза. Таким образом, для реализации идеи инерционного термоядерного синтеза в присутствии магнитного поля, прежде всего, возникает потребность в надежном определении физических характеристик неизотермической плотной плазмы в магнитном поле. Эти знания необходимы и для решения важнейшей технологической задачи инерционного термоядерного синтеза: определение оптимальной конструкции мишени и характеристик драйвера.

Благодарность

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Республики Казахстан в рамках гранта АР09258792 «Транспортные, оптические и термодинамические свойства неизотермической плотной плазмы инерционного термоядерного синтеза в магнитном поле».

Литература

3 Goff J., Casper T., Murray S. Toroidal magnetic confinement and coil power supplies in ITER // IEEE 2011 Intern. Conf. on Electrical Machines and Systems, 20-23 Aug. 2011 – ID 12389799.

¹ Hoffmann D.H.H. et al. Frontiers of dense plasma physics with intense ion and laser beams and accelerator technology // Phys. Scripta. -2006. - Vol. 1. - P. 123.

² Tahir N.A., Deutch C., Fortov V. et al. Proposal for the Study of Thermophysical Properties og High-Energy-Density Matter Using Current and Future Heavy-Ion Accelerator Facilities at GSI Darmstadt // Phys. Rev. Lett. – 2005. – Vol. 96. – № 3. – P. 035001.

4 Freidberg J.P., Mangiarotti F.J., Minervini J. Designing a tokamak fusion reactor – How does plasma physics fit in? // Physics of Plasmas. – 2015. – Vol. 22 (7). – P. 070901.

5 Hassanein A., Sizyuk V. Potential design problems for ITER fusion device // Scientific Reports. – 2021. – Vol. 11 (1). – P. 2069.

6 Toepffer C. Scattering of magnetized electrons by ions // Phys. Rev. A. - Vol. 66. - P. 160.

7 Jiang Ch., Li D. and Dong Ch. Magnetized Rutherford scattering angle for electron-ion collision in plasma // arXiv:2101.05943. - 14 p.

8 Nersisyan H., Zwicknagel G. Binary collisions of charged particles in a magnetic field // Physical Review E. – 2009. – Vol. 79. – ID 066405 (1-18).

9 Dong C., Ren H., Cai H., and Li D. Effects of magnetic field on anisotropic temperature relaxation // Physics of Plasmas. - 2013. - Vol. 20. - ID 032512.

10 Ramazanov T.S., Kodanova S.K., Bastykova N.Kh., Moldabekov Zh.A. Effect of dust particle polarization on scattering processes in complex plasmas // Recent Contributions to Physics (Rec.Contr.Phys.). – 2015. – Vol. 53, no. 2. – P. 74-82.

11 Ramazanov, T.S. et al. Classical scattering of an ion influenced by polarization effect of dust particles // Recent Contributions to Physics (Rec.Contr.Phys.). -2018. -Vol. 65, no 2. -P.44-50.

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

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

14 Issanova M.K., Kodanova S.K., Ramazanov T.S., Bastykova N.Kh., Moldabekov Zh.A., Meister C.-V. Classical scattering and stopping power in dense plasmas: the effect of diffraction and dynamic screening // Laser and Particle Beams. – 2016. – Vol. 34. – P. 457-466.

15 Wang W.-M. et.al. Magnetically Assisted Fast Ignition // Phys. Rev. Lett. - 2015. - Vol. 114. - P. 015001.

16 Laweet K.F F. et.al. Direct measurement of kilo-tesla level magnetic field generated with laser-driven capacitor-coil target by proton deflectometry // Appl. Phys. Lett. – 2016. – Vol. – 108. – P. 091104.

17 Luan S.X. et. al. Laser Pulse Compression Using Magnetized Plasmas // Phys. Rev E. - 2016. - Vol. 94. - P. 053207.

References

- 1 D.H.H. Hoffmann et al., Phys. Scripta, 1, 123 (2006).
- 2 N.A. Tahir, C. Deutch, V. Fortov et al., Phys. Rev. Lett., 96 (3), 035001 (2005).
- 3 J. Goff, T. Casper, S. Murray, IEEE 2011 Intern. Conf. on Electrical Machines and Systems, 20-23 Aug. 2011 (2011).
- 4 J.P. Freidberg, F.J. Mangiarotti, J. Minervini, Phys. Plasmas, 22 (7), 070901 (2015).
- 5 A. Hassanein, V. Sizyuk, Sci. Rep., 11 (1), 2069 (2021).
- 6 C. Toepffer, Phys. Rev. A, 66, 160 (2002).
- 7 Ch. Jiang, D. Li and Ch. Dong, arXiv: 2101.05943.
- 8 H. Nersisyan, G. Zwicknagel, Phys. Rev. E, 79, 066405 (2009).
- 9 C. Dong, H. Ren, H. Cai, and D. Li. Phys. Plasmas, 20, 032512 (2013).
- 10 T.S. Ramazanov, S.K. Kodanova, N.Kh. Bastykova, Zh.A. Moldabekov, Rec. Contr. Phys., 53 (2), 74-82 (2015).
- 11 T.S. Ramazanov et al., Rec. Contr. Phys., 65(2), 44-50 (2018).
- 12 C.A. Ordonez, M.I. Molina, Phys. Plasmas, 1, 2515 (1994).
- 13 T.S. Ramazanov, S.K. Kodanova, Phys. Plasmas, 8, 5049 (2001).

14 M.K. Issanova, S.K. Kodanova, T.S. Ramazanov, N.Kh. Bastykova, Zh.A. Moldabekov, C.-V. Meister, Laser. Part. Beams, 34, 457-466 (2016).

- 15 W.-M. Wang et.al., Phys. Rev. Lett., 114, 015001 (2015).
- 16 K.F.F. Laweet et al., Appl. Phys. Lett., 108, 091104 (2016).
- 17 S.X. Luan et al., Phys. Rev E., 94, 053207 (2016).

3-бөлім

КОНДЕНСИРЛЕНГЕН КҮЙ ФИЗИКАСЫ ЖӘНЕ МАТЕРИАЛТАНУ ПРОБЛЕМАЛАРЫ. НАНОҒЫЛЫМ

Section 3

CONDENSED MATTER PHYSICS AND MATERIALS SCIENCE PROBLEMS. NANOSCIENCE

Раздел 3

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯ-НИЯ И ПРОБЛЕМЫ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ. НАНОНАУКА МРНТИ 29.19.03

https://doi.org/10.26577/RCPh.2021.v78.i3.03

А.У. Алдияров*^(D), Д.Ю. Соколов^(D), А. Тыченгулова^(D), Д. Ережен^(D)

Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Казахстан, г. Алматы *e-mail: Abdurahman.Aldiarov@kaznu.kz

КОЛЕБАТЕЛЬНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ТОНКИХ ПЛЕНОК КОНДЕНСАТОВ СМЕСИ ЭТАНОЛА С ИНЕРТНЫМ ГАЗОМ

Известно, что, изменяя концентрацию в инертной среде, можно образовывать кластеры различных размеров любого вещества путем их конденсации на холодную подложку из газовой фазы. Традиционно к таким системам относятся молекулярные криокристаллы. В данной работе представлены результаты ИК-спектрометрических исследований криовакуумных конденсатов смеси этанола в азоте. Основной задачей данного исследования является объяснение сложного, чаще всего, неоднозначного поведения тонких пленок криовакуумных конденсатов этанола в процессе его соконденсации с азотом. С этой целью были проведены ИК-спектрометрические исследования криоосажденных тонких пленок смесей «этанола в азоте» в различных концентрационных соотношениях. Объектами исследований являются тонкие пленки криоконденсатов смеси этанола с инертным газом (азотом). Температура конденсации T_d = 16 K. Давление газовой фазы смеси при криоконденсации P = 10⁻⁵ Торр. Диапазон концентраций этанола в смесях составлял от 3 % до 90 %. Спектральный ИК-диапазон измерения составлял 400-4200 1/см. Предполагается, что изменение концентрации этанола в смеси приводит к образованию различных кластерных составов молекул этанола, растворенных в инертной среде. **Ключевые слова:** спектроскопия, тонкие пленки, криоконденсаты, этанол, смеси.

> A.U. Aldiyarov*, D.Y. Sokolov, A. Z. Tychengulova, D. Yerezhep Al-Farabi Kazakh National University, Kazakhstan, Almaty *e-mail: Abdurakhman.Aldiyarov@kaznu.kz

Vibrational spectroscopy of thin film condensates of ethanol mixture with inert gase

It is known that by changing the concentration in an inert medium, it is possible to form clusters of various sizes of any substance by condensing them on a cold substrate from the gas phase. Traditionally, such systems are presented by molecular cryocrystals. This paper demonstrates the results of IR spectrometric studies of cryovacuum condensates of ethanol mixture with nitrogen. The main task of this study is to explain the complex, most often, ambiguous behavior of thin films of ethanol cryovacuum condensates in the process of its co-condensation with nitrogen. For this purpose, vibrational spectroscopy of cryodeposited thin films of "ethanol in nitrogen" mixtures in various concentration ratios was performed. The objects of research are thin films of cryocondensates of ethanol mixture with inert gas (N2). The samples were condensed at the temperature T = 16 K. The pressure of the gas phase of the mixture during cryocondensation was kept at $P = 10^{-5}$ Torr. The range of ethanol concentrations in the mixtures varied from 3% to 90%. The spectral range of measurements was considered in 400-4200 1/cm. It is assumed that the change in the concentration of ethanol in the mixture leads to the formation of various cluster compositions of ethanol molecules dissolved in an inert medium.

Key words: vibrational spectoscopy, thin film, cryocondensates, alcohol, cluster, relaxation, kinetic stability.

А.У. Алдияров*, Д.Ю. Соколов, А. Тыченгулова, Д. Ережеп Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Қазақстан, Алматы қ. *e-mail: Abdurakhman.Aldiyarov@kaznu.kz

Инертті газбен этанол қоспасының конденсаттарының жұқа үлдірлерінің тербелмелі спектроскопиясы

Кез келген заттың инертті ортада концентрациясын өзгерте отырып, газ фазадан суық төсемеге конденсациялау арқылы олардың әр түрлі өлшемдегі кластерлерін түзуге болатындығы белгілі болып табылады. Дәстүрлі түрде мұндай жүйелерге молекулалық криокристалдар жататыны белгілі. Бұл зерттеу жұмыста азоттағы этанолдың криовакуумды конденсатын ИҚспектрометриялық зерттеу нәтижелері алынды және мақалада келтірілді. Зерттеудің негізгі міндеті – бұл этанолдың криовакуумды конденсаттарының азотпен бірге конденсациялану процесінде олардың жұқа үлдірлерінің күрделі және көбінесе бірмәнді емес әрекеттерін түсіндіру. Осы мақсатта әр түрлі концентрациялық қатынастағы «азоттағы этанол» қоспасының криотұндырылған жұқа үлдірлерін ИҚ-спектрометриялық зерттеу жүргізілген. Зерттеу нысандары инертті газ бен (N₂) этанол қоспасының криоконденсация кезінде қоспаның газ фазасының қысымы P = 10⁻⁵ Торр. Қоспалардағы этанол концентрациясының диапазоны 3 % бастап 90 % дейін жетеді. Спектрлік ИҚ өлшеу диапазоны 400 – 4200 1/см құрады. Қоспадағы этанол концентрациясының өзгерісі инертті ортада еріген этанол молекуласының әр түрлі кластерлік құрамының түзілуіне алып келеді деп болжанады.

Түйін сөздер: спектроскопия, жұқа үлдірлер, криоконденсаттар, спирт, кластерлер, релаксация, кинетикалық тұрақтылық.

Введение

Одной из быстро развивающихся областей современной физики является физика конденсированных сред с неупорядоченной структурой. К ним относятся почти все твердые тела, у которых отсутствует дальний порядок в расположении частиц. Безусловно, в этом плане нельзя не отметить жидкости и жидкие металлы, представляющие научно-практический интерес, как наиболее распространенные конденсированные среды с неупорядоченной структурой. Как известно, отсутствие дальнего порядка в этих средах обусловлено беспорядочным тепловым движением атомов и молекул. Целый пласт системы с неупорядоченной структурой также составляют сильнолегированные полупроводниковые материалы [1-5], в которых неупорядоченность вызвана хаотическим распределением примесных атомов в основной матрице вещества, непериодические металлические сплавы и кристаллы, в элементарной ячейке которых имеются больше пустых мест, чем атомов.

В настоящее время наблюдается все возрастающий интерес в области изучения электрических и магнитных свойств неупорядоченных твердых систем с переносом заряда и водородной связью. Особенность водородной связи состоит в том, что участвующие в ней одновалентный атом водорода, связанный с электроотрицательным атомом молекулы ковалентной связью, одновременно связывается и с другим атомом той же молекулы или другой молекулы. В результате образования водородной связи вещество приобретает структуру, определяемую наличием в нем большого числа ассоциатов, величина и строение которых могут быть весьма различными [6]. Водородные связи имеют огромное влияние на различные химические [7], биологические [8,9], и физические [10] процессы. Молекулы многих веществ вступают межмолекулярную водородную связь, у которых в составе молекулы имеется гидроксильная группа. Традиционно к этим веществам относятся вода, и из числа углеводородов относятся все виды спиртов.

Наибольшее число исследователей изучают молекулу метанола, как наиболее простого представителя одноатомного спирта, которая имеет межмолекулярную водородную связь и общую для всех спиртов возможность внутреннего вращения гидроксильной группы относительно С-О связи [11]. Эти и другие особенности обусловили большой интерес исследователей к изучению свойств спиртов, который лишь усилился после того как было установлено, что молекулы этанола присутствуют в межзвездных облаках газа [12]. Известно, что в межзвездных облаках газа самой распространенной молекулой является Н₂, который присоединяется к более тяжелым атомам, таким как О, С, и др., и приводит к образованию воды и других насыщенных частиц, вплоть до СН₃СН₂ОН [13].

Одной из сложностей молекулы CH_3CH_2OH (этанол) является большое количество возможных стабильных структур мономера этанола. Существует три изоэнергетических изомера мономера этанола: гош-, анти и гош+ (относительно значения двугранных углов ССОН -60°, 180° и +60° соответственно) [14]. В целом, изучение молекул спиртов позволяет более детально проследить переход от одиночных молекул в газовой среде к жидким и стеклообразным средам, а также изменение спектральных характеристик на этом пути.

Основной задачей данного исследования является объяснение сложного, чаще всего, неоднозначного поведения тонких пленок криовакуумных конденсатов этанола в ходе термостимулированных превращений с точки зрения влияния на эти процессы ассоциации молекул CH₃CH₂OH. С этой целью были проведены ИК спектрометрические исследования криоосажденных тонких пленок смесей «этанола в азоте» в различных концентрационных соотношениях. Таким образом, объектами исследований являются тонкие пленки криоконденсатов смеси этанола с инертным газом (азотом). Предполагается, что изменение концентрации этанола в смеси приводит к образованию различных кластерных составов молекул этанола, растворенных в инертной среде.

Эксперимент, методика и материалы

Исследования были проведены на экспериментальной установке, представляющей собой универсальный низкотемпературный спектрофотометр. Эскиз установки схематично представлен на рисунке 1. Основным узлом установки является вакуумная камера (1). Для получения чистого и высокого вакуума в камере используется турбомолекулярный насос (2) типа Turbo-V-301 фирмы «Agilent Technologies, USA», который соединен с пространством камеры шиберным затвором (3) CFF-100 фирмы «VVT, Switzerland». Для предварительной откачки вакуумной камеры используется сухой спиральный насос типа SH-110 фирмы «Agilent Technologies, USA» (на рисунке не показан). При этом предельное значение вакуума в камере достигало Р=10-8 Торр. Для контроля и измерения давления в рабочей камере использовался широкодиапазонный датчик давления (4) СС-10 фирмы «Televac, USA» с контроллером.

В центральной нижней части камеры расположена микрокриогенная система Гиффорда-Мак-Магона (5). Зеркальная подложка (6), которая служит поверхностью для конденсации исследуемых веществ, закреплена на верхнем фланце микрокриогенной машины. Материалом подложки является медь с рабочей поверхностью, которая покрыта слоем алюминия. Диаметр подложки равен d=35 мм. Минимальная достижимая температуры на подложке Т = 12 К. Для непрерывного контроля температуры используется кремниевый датчик ДТ 670-1.4 с термоконтроллером model 325 фирмы «LakeShore, USA». Измерение толщины и скорости конденсации осуществляется двухлучевым лазерным интерферометром (9) на базе фотоэлектронных умножителей P25a-SS-0-100.

Для приготовления смеси использовались пары жидкого этанола с чистотой не менее 99,9% фирмы «SeccoSolv» и газообразный азот с чистотой 99,993% фирмы «IHSAN TECHNOGAZ». Методика эксперимента осуществлялась в следующем порядке. Вакуумную камеру откачивали до давления P = 10⁻⁸ Торр. Включается микрокриогенная машина для охлаждения подложки до необходимой температуры T = 12 К. После достижения необходимой температуры с помощью системы напуска (11) устанавливается в камере рабочее давление конденсации смеси $P = 10^{-5}$ Торр, при котором начинается процесс криоосаждения пленки, контролируемой двухлучевым лазерным интерферометром (9). По достижении необходимой толщины образца (около 25-30 мкм) напуск газа прекращается, и в камере вновь устанавливается давление порядка $P = 10^{-8}$ Торр. Далее измеряется инфракрасный спектр образца при помощи спектрометра ИКС 29 (10) фирмы «LOMO, Russia».

Результаты

На рисунке 2 продемонстрированы колебательные ИК спектры криовакуумных конденсатов смеси азот-этанол с различными концентрациями этанола. Спектральный диапазон составляет от 400 до 4200 1/см. Температура подложки при конденсации составляла Т = 12К. Концентрация этанола в азоте соответствовала с установленной толщиной образца: С = 0,5% (12,5 MKM), C = 3% (10 MKM), C = 5% (7,5 MKM)), C = 10% (5 MKM), C = 24% (4,5 MKM), C = 50%(4 MKM), C = 70% (3,5 MKM), C = 90% (3 MKM). Толщина образцов устанавливалась в зависимости от концентрации этанола в смеси, так чтобы эффективное взаимодействие ИК излучения с молекулами СН, СН, ОН оставалось постоянным. Спектры различных образцов для удобства анализа и сравнения были разнесены по вертикали. На рисунке приведены следующие обозначения характеристических полос поглощения: n(CO) – валентные колебания С-О-связи; n+d+r(CH) - комбинации деформационных, валентных и веерных колебаний; d(COH) – деформационные колебания по линии C-O-H; n(CH) – валентные колебания С-Н-связи; n(OH) – валентные колебания О-Н-связи. Для анализа и обсуждения полученных результатов необходимо рассмотреть по отдельности диапазоны рассматриваемых частот, соответствующих характеристическим колебаниям молекулы этанола.



Рисунок 1 – Эскиз экспериментальной установки. 1 – вакуумная камера; 2 – вакуумный насос Turbo-V-301; 3 – шиберный вакуумный затвор CFF-100; 4 – датчик давления CC-10; 5 – рефрижератор Гиффорда-Мак-Магона; 6 – подложка; 7 – источник когерентного излучения; 8 – оптический канал ИК-спектрометра; 9 – лазерный интерферометр; 10 – ИК-спектрометр; 11 – система натекания; 12 – масс-спектрометр серии Extorr XT 100

Интервал частот 880-900 1/см относится к валентным СО колебаниям и их комбинациям с вращательными колебаниями метиловой и метиленовой группы. Комбинации валентных, вращательно-колебательных частот расположены в интервале 1000-1200 1/см. Частоты деформационных и веерных колебаний СН₃ и СН₂ групп вмещается в интервал 1300-1500 1/см. Симметричные и асимметричные валентные колебания С-Н связи метиловой СН₃ и метиленовой СН₂ группы расположены в диапазоне частот от 2800 до 3000 1/см. Интервал 3000-3700 1/см соответствует валентным колебаниям О-Н связи в свободным и связанным состояниям молекул.

Обычно при исследовании спектральных характеристик образования Н-связанных ассоциатов в спиртах основное внимание уделяется области валентных колебаний ОН-группы (3000–3800 1/см), потому что именно эта группа принимает активное участие в формировании водородной связи. Их очевидное различие в спектрах обусловлено разной степенью водородосвязанности в агрегатах этанола, находящихся в смеси.

В соответствии с данными, приведенными на рисунке 2, полоса поглощения на v = 36601/см (показано стрелкой) в спектрах с малыми концентрациями (С = 3%, 5%, 10%) может быть комментирована как колебания ОН-связи мономеров и димеров молекул СН₂СН₂ОН. Как видно, это полоса наблюдается в основном на спектрах образцов с малыми концентрациями, которая исчезает с повышением концентрации этанола в смеси. Ее сдвиг в низкочастотную область по сравнению с характерными частотами мономеров и димеров, находящихся в газовой фазе [15,16], является, судя по всему, результатом влияния кристаллической решетки азота. Таким образом, эта полоса с частотой v = 3660 1/см, которая идентифицируется при малых концентрациях, соответствует колебаниям ОНгруппы, не принимающей участие в формировании водородной связи, то есть принадлежит мономерам и димерам. А широкая полоса (v = 3000-3500 1/см), находящаяся в низкочастотной области обычно относятся к колебаниям водоро-

досвязанных ОН-групп. Таким образом, мы относим полосу поглощения в частотном диапазоне v = 3000-3500 1/см к колебаниям n(OH) более высоким кластерам молекул CH₃CH₂OH.



Рисунок 2 – Колебательные спектры тонких пленок криоконденсатов смеси азот-этанол с различными концентрациями этанола. Температура конденсации 16 К. Толщина образцов в соответствии с концентрациями этанола:
10 мкм (C = 3%), 7,5 мкм (C = 5%), 5 мкм (C = 10%), 4,5 мкм (C = 24%), 4 мкм (C = 50%), 3,5 мкм (C = 70%), 3 мкм (C = 90%)

Интервал частот 2800-3000 1/см включает валентные колебания CH-связи метиловой и метиленовой группы этанола. На рисунке 2 данный интервал обозначен стрелкой. Ярко выраженный узкий пик поглощения на частоте v=2980 1/см относится к валентным асимметричным колебаниям CH-связи метиловой группы v(CH₃) [17]. Форма данной полосы существенно не из-

меняется в зависимости от концентрации этанола в смеси. Можно сделать вывод, что изменение концентрации этанола не влияет на этот тип колебания молекулы CH₃CH₃OH.

Интервал частот 1200-1500 1/см относится к частотам различного рода деформационных колебании. На рисунке 2 данный интервал выделен штриховкой. Как видно из рисунка, струк-

тура спектров смесей этанола с азотом для концентраций С = 3%, 5%, 10%, 24%, более сложна нежели спектры больших концентраций (50%, 70%, 90%). Из множества характерных пиков спектра малых концентрации рассматриваемом интервале частот остается четыре характерных полос поглощения. Исчезает полоса со средней частотой v=1260 1/см, которая соответствует деформационному колебанию δ(СОН)-anti. Сущность данного изменения заключается, видимо, в том, что по линии связи δ(COH)-anti осуществляется образование циклических полиагрегатов этанола с последующим затормаживанием данного типа колебании. Другие характерные пики относиться к деформационному колебанию δ(COH)-gauch изомерам. Они особо не подвергаются изменениям. Таким образом, можно сделать предположение, что связь $\delta(COH)$ -gauch не участвует в кластерообразовании молекул этанола.

Диапазон частот 1000-1200 1/см относится к полосам поглощения, относящимся к комбинациям валентных колебаний с вращательными колебаниями метиловой и метиленовой группы (n+d+r(CH)), и деформационными колебаниями ОН-связи. Вид спектра полосы поглощения смеси с малыми концентрациями этанола более сложный, чем с большими концентрациями. Спектр смеси с концентрациями С = 3%, 5%, 10%, 24% имеет в рассматриваемом диапозоне три широких ярко выраженных пика поглощения. Видно, что в этой области спектра также происходят существенные изменения с повышением концентрации этанола в смеси. При малых концентрациях в этом частотном интервале регистрируются три интенсивные полосы с частотами v=1028 1/см, v=1054 1/см, v=1089 1/ см. Интенсивность полосы с частотой v=1028 1/см уменьшается с ростом концентрации, и выше концентрации С = 24% полностью исчезает. Суть трансформаций этих колебаний можно объяснить, основываясь на анализе приведенных в следующих работах [16,18]. Так, полоса с максимумом поглощения v=1028 1/см соответствует комбинации валентных колебаний v(CCO) с вращательными колебаниями метиловой группы r(CH₂). Полоса поглощения с центром на v=1054 1/см связан с комбинацией валентных v(ССО) колебаний с деформационными колебаниями δ(СОН) связи. Данные колебания относятся к gauche-конформам этанола. Если принимать во внимание склонность молекул СН, СН, ОН к образованию циклических кластеров, то становится понятным слияние этого колебания с другой полосой (v=1028 1/см) при росте концентрации этанола в азоте и полное исчезновение этой полосы у образцов с высокими концентрациями. Таким образом, колебания СОН-связи активно участвуют в формирование циклических кластеров и осуществляют «затормаживание» колебаний с ростом размера кластеров в криопленке.

Интервал частот 800-1000 1/см соответствует валентным колебаниям v(CCO), а также модам комбинаций этих колебаний с вращательными колебаниями метиловой группы. В измеренном интервале концентраций пик поглощения с центром на частоте v=885 1/см представляет собой почти симметричную монополосу. Частота данной полосы существенно не меняется с ростом концентрации этанола в азоте, но по амплитуде имеется небольшое изменение. Этот факт наводит на мысль, что полоса не участвует в формировании циклических кластеров молекул этанола в азоте, но может дать информацию об их количестве.

Далее нами были изучены основные характеристические полосы поглощения молекул этанола в азоте, которые наиболее хорошо реагируют на изменения концентрации этанола в растворе, на предмет их стабильности при отогреве. К этим частотам относятся частоты комбинации вращательных и валентных колебаний и деформационных колебаний ОН-связи относительно оси С-С-О. Цель этого изучения связано с тем, что одним из аспектов исследований является изучение процесса реорганизаций молекул этанола в матрице азота после отогрева, а также оптических свойств образованных в пленке структур. Ожидалось, что благодаря наличию межмолекулярной водородной связи будут осуществляться процессы самоорганизации молекул этанола на промежуточной стадии, т.е. между температурой конденсации и температурами ступенчатого отогрева.

Результаты полученных данных при фиксированных температурах ступенчатого отогрева образца приведены на рисунке 3. Для анализа были выбраны данные 3% образца тонкой пленки криоконденсатов смеси этанола в азоте. Этот выбор обусловлен наглядностью данных с графической точки зрения и его экспериментальной легковоспроизводимостью. На рисунке диапазон частот комбинации вращательных и валентных колебаний показан слева, а диапазон деформационных колебаний ОН-связи относительно оси С–С–О показан справа. Наиболее характерными полосами поглощения в этих диапазонах являются полосы поглощения с минимумами на частотах v=1028 1/см и v=1260 1/см.

Наличие полос поглощения на частотах v=1028 1/см и v=1260 1/см означает, что в рассматриваемой системе присутствуют мономеры и димеры этанола [15,16,18–20]. Изменение амплитуды поглощения на этих частотах с повышением температуры указывает на наличие процесса объединения мономеров и димеров молекул этанола в более крупные агрегаты. При этом в этом процессе активное участие принимает взаимодействие по H-связи, варианты которой продемонстрированы на рисунке 4.



Рисунок 3 – Колебательные спектры 3% раствора этанола в матрице азота в окрестностях частот комбинаций вращательных и валентных колебаний (слева) и деформационных колебаний ОН-связи относительно оси С-С-О (справа) при указанных температурах матрицы

Как мы ранее отмечали, полоса с максимум поглощения на частоте v=1028 1/см соответствует комбинации валентных колебаний v(ССО) с вращательными колебаниями метиловой группы r(CH3) [18]. Необходимо отметить, что данное колебание относится к трансконформному состоянию молекулы этанола. Полоса поглощения в окрестностях частоты 1060 1/см связана с комбинацией валентных v(CCO) и вращательных $r(CH_2)$ колебаний с деформационными колебаниями δ (OH) COH-связи. При этом данное колебание относиться к gauche-конформам этанола. Полоса поглощения на частоте v = 1095 1/см относится к комбинации валентных колебаний v(CCO) с вращательными колебаниями метиловой группы r(CH₃). Полоса поглощения

на частоте v=1060 1/см соответствует деформационным колебаниям О-Н относительно оси С-С-О молекулы. Широкая полоса в районе частоты v=1300 1/см представляет либрационные колебания метиловой и метиленовой групп молекулы этанола.



Рисунок 4 – Схематичное представление мономеров СН₂СН₂ОН и ее кластеров

Полосы поглощения на частотах v=1028 1/ см и v=1260 1/см молекулы этанола в азоте соответствуют квази-свободной молекуле этанола в азоте. Эти полосы поглощения на рисунке 3 выделены штриховкой. Всевозможные изменения формы пика на этой частоте соответствуют изменению проявления колебаний этанола в направлении большей степени связанности. Понятно, что амплитуда угловых колебаний О-Н относительно оси С-С-О молекулы СН,СН,ОН должна быстро уменьшаться при взаимодействии по водородной связи с кислородом соседней молекулы этанола. Как видно из рисунка 3, повышение температуры криопленки, начиная с температуры конденсации (T=16K), приводит к уменьшению амплитуды поглощения.

Заключение

На основании анализа полученных результатов исследования можно сделать следующие общие выводы:

• при соконденсации этанола с азотом на холодную подложку с температурой T=16 К образуется криоконденсат с содержанием кластеров различных размеров молекул CH₃CH₂OH.

• полосы поглощения в интервале частот 3000–3700 1/см ИК-спектре тонких пленок смеси этанола с азотом указывают на наличие в криопленке следующих агрегатов молекул этанола: мономер, димер, циклический димер, циклический тример, циклический тетрамер, гексомер и т.д. в зависимости от концентраций этанола в азоте. Широкая полоса в интервале 3250–3330 1/ см означает наличие в матрице крупных полиагрегатов, в которых молекулы этанола находятся в водородосвязанном состоянии (multimer).

 локальный минимум с частотой 1260 1/ см, которая соответствует деформационным колебаниям б(СОН), полностью исчезает по мере увеличения концентрации этанола в смеси, в то время как полоса поглощения на частоте 1300 1/ см сохраняется. Объяснением этого является то, что в тонкой пленке криоконденсата увеличивается количество циклически крупных полиагрегатов связанных межмолекулярной водородной связью молекул этанола. Можно утвердить, что колебательный процесс δ (СОН) активно участвует в образовании малых кластеров этанола в смеси.

• расщепление полосы валентных ССОколебаний (1028 1/см и 1060 1/см) при уменьшении концентрации этанола в смеси связано с образованием мономеров и димеров этанола свободных от межмолекулярной водородной связи.

Благодарности

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Республики Казахстан, грант № АР08855738.

Литература

1 Böer K.W. and Pohl U.W. Semiconductor Physics. – Springer International Publishing: Cham, 2018. – P. 1299.

2 Appani S.K., Rayapati S. V., Sutar D.S. and Major S.S. Study of transparent conducting Ga-doped ZnO films grown by reactive co-sputtering of Zn and GaAs // AIP Conf. Proc. – 2018. – Vol. 1942. – P.120009.

3 Tripathi D.C., Asor L., Zaharoni G., Banin U. and Tessler N. Surface Versus Impurity-Doping Contributions in InAs Nanocrystal Field Effect Transistor Performance // J. Phys. Chem. C. – 2019. – Vol. 123. – P. 18717-18725.

4 Baron E., Goldhahn R., Deppe M., As D.J. and Feneberg, M. Photoluminescence Line-Shape Analysis of Highly n-Type Doped Zincblende GaN // Phys. status solidi. – 2020. Vol. 257. – P.1900522.

5 Abram R.A., Rees G.J. and Wilson B.L.H. Heavily doped semiconductors and devices // Adv. Phys. – 1978. – Vol. 27. – P.799-892.

6 Gilli G. and Gilli P. The Nature of the Hydrogen Bond: Outline of a Comprehensive Hydrogen Bond Theory. – Oxford University Press, 2009.

7 Chen B., Li F., Zou L. and Chen D. Intermolecular hydrogen bonding-mediated synthesis of high-quality photoluminescent carbon dots for label-free fluorometric detection of Fe3+ ions // J. Colloid Interface Sci. – 2019. – Vol. 534. – P.381-388.

8 Gai F., Fan M., Yang X., Hao C., Ao Y., Duan C., Liu Y. and Huo Q. Hydrogen bond-induced bright enhancement of fluorescent silica cross-linked micellar nanoparticles // J. Colloid Interface Sci. – 2018. – Vol. 519. – P. 224-231.

9 Jiang R., Lu G., Yan Z., Wu D., Liu J. and Zhang X. Enhanced photocatalytic activity of a hydrogen bond-assisted 2D/2D Z-scheme SnNb2O6/Bi2WO6 system: Highly efficient separation of photoinduced carriers // J. Colloid Interface Sci. – 2019. – Vol. 552. – P. 678-688.

10 Panicker L., Thomas S.P., Wadawale A., Girija K.G. and Row T.N.G. Reversible order-disorder phase transition and interaction topology in 4-carboxyanilinium nitrate // J. Mol. Struct. – 2020. – Vol. 1227. – P.129542.

11 Boda M. and Patwari G.N. Internal electric fields in methanol [MeOH] 2–6 clusters // Phys. Chem. Chem. Phys. – 2020. – Vol. 22. – P.10917-10923.

12 Chuang K.-J., Fedoseev G., Qasim, D., Ioppolo S., Jäger C., Henning T., Palumbo M.E., van Dishoeck E.F. and Linnartz H. Formation of complex molecules in translucent clouds: acetaldehyde, vinyl alcohol, ketene, and ethanol via "nonenergetic" processing of C2 H2 ice // Astron. Astrophys. – 2020. – Vol. 635. – P. 199.

13 Oba Y., Osaka K., Chigai T., Kouchi A. and Watanabe N. Hydrogen-deuterium substitution in solid ethanol by surface reactions at low temperatures // Mon. Not. R. Astron. Soc. - 2016. - Vol. 462. - P. 689-695.

14 Malloum A., Fifen J.J. and Conradie J. Exploration of the potential energy surface of the ethanol hexamer // J. Chem. Phys. – 2019. – Vol. 50. – P. 124308.

15 Wassermann T.N. and Suhm M.A. Ethanol Monomers and Dimers Revisited: A Raman Study of Conformational Preferences and Argon Nanocoating Effects // J. Phys. Chem. A. – 2010. – Vol. 114. – P. 8223-8233.

16 Zielke P. and Suhm, M.A. Concerted proton motion in hydrogen-bonded trimers: A spontaneous Raman scattering perspective // Phys. Chem. Chem. Phys. - 2006. - Vol. 8. - P. 2826.

17 González L., Mó O. and Yáñez M. Density functional theory study on ethanol dimers and cyclic ethanol trimers // J. Chem. Phys. – 1999. – Vol. 111. – P. 3855-3861.

18 Coussan S., Bouteiller Y., Perchard J.P. and Zheng W.Q. Rotational Isomerism of Ethanol and Matrix Isolation Infrared Spectroscopy // J. Phys. Chem. A. – 1998. – Vol. 102. – P.5789-5793.

19 Larsen R.W., Zielke P. and Suhm M.A. Hydrogen-bonded OH stretching modes of methanol clusters: A combined IR and Raman isotopomer study // J. Chem. Phys. – 2007. – Vol. 126. – P. 194307.

20 Luck W.A.P. and Schrems O. Infrared matrix isolation studies of self-association of methanol and ethanol: proof of cyclic dimers // J. Mol. Struct. – 1980. – 60. – P. 333-336.

А.У. Алдияров и др.

References

- 1 K.W. Böer and U.W. Pohl, Semiconductor Physics, (Springer International Publishing, 2018).
- 2 S.K. Appani, S.V. Rayapati, D.S. Sutar, and S.S. Major, AIP Conf. Proc. 1942, 120009 (2018).
- 3 D.C. Tripathi, L. Asor, G. Zaharoni, U. Banin, and N. Tessler, J. Phys. Chem. C 123, 18717-18725 (2019).
- 4 E. Baron, R. Goldhahn, M. Deppe, D.J. As and M. Feneberg, Phys. status solidi 257, 1900522 (2020).
- 5 A. Abram, G.J. Rees, and B.L.H. Wilson, Adv. Phys. 27, 799-892 (1978).
- 6 G. Gilli and P. Gilli, The Nature of the Hydrogen Bond, (Oxford University Press, 2009).
- 7 B. Chen, F. Li, L. Zou, and D. Chen, J. Colloid Interface Sci. 534, 381-388 (2019).
- 8 F. Gai et al., J. Colloid Interface Sci. 519, 224-231 (2018).
- 9 R. Jiang, G. Lu, Z. Yan, D. Wu, J. Liu, and X. Zhang, J. Colloid Interface Sci. 552, 678-688 (2019).
- 10 L. Panicker, S.P. Thomas, A. Wadawale, K.G. Girija, and T.N. G. Row, J. Mol. Struct. 1227, 129542 (2020).
- 11 M. Boda and G.N. Patwari, Phys. Chem. Chem. Phys. 22, 10917-10923 (2020).
- 12 K.-J. Chuang et al., Astron. Astrophys. 635, 199 (2020).
- 13 Y. Oba, K. Osaka, T. Chigai, A. Kouchi, and N. Watanabe, Mon. Not. R Astron. Soc. 462, 689-695 (2016).
- 14 A. Malloum, J.J. Fifen and J. Conradie, J. Chem. Phys. 150, 124308 (2019).
- 15 T.N. Wassermann and M.A. Suhm, J. Phys. Chem. A 114, 8223-8233 (2010).
- 16 P. Zielke and M.A. Suhm, Phys. Chem. Chem. Phys. 8, 2826 (2006).
- 17 L. González, O. Mó, and M. Yáñez, J. Chem. Phys. 111, 3855-3861 (1999).
- 18 S. Coussan, Y. Bouteiller, J.P. Perchard, and W.Q. Zheng, J. Phys. Chem. A 102, 5789-5793 (1998).
- 19 R.W. Larsen, P. Zielke and M.A. Suhm, J. Chem. Phys. 126, 194307 (2007).
- 20 W.A.P. Luck and O. Schrems, J. Mol. Struct. 60, 333-336 (1980).

IRSTI 55.16.15; 27.35



ITMO University, Russia, St. Petersburg, *e-mail: Kovanov76@yandex.ru

SCROLL COMPRESSOR. ANALYSIS OF CALCULATION METHODS

The paper deals with some aspects of mathematical modeling of a scroll compressor. Various approaches to modeling the working processes of machines of the volumetric compression principle, their applied value and priority of use are presented. An analytical review of the methods for calculating the leakage of a compressed medium, applied to a scroll compressor, taking into account the classification of slots, is carried out. Conclusions are made about the need to clarify the assumptions and improve this technique by taking into account the fact of the mobility of the walls of the gap, depending on the share of the influence of various factors on the leakage of the compressed medium. And also about the influence of this fact on the accuracy of calculations and the optimal choice of the operating mode of the compressor. Examples are given in which taking this condition into account in the transformed systems of equations will improve the accuracy in applied calculations of the working processes of spiral machines, when designing new samples.

Key words: Scroll compressor, calculation method, mathematical modeling, mass flow rate of the working substance, regrinding of the compressed medium.

А.В. Кованов*, Д.В. Жигновская, В.А. Цветков, В.А. Пронин

ИТМО Университеті, Ресей, Санкт-Петербург қ. *e-mail: Kovanov76@yandex.ru

Спираль компрессор. Есептеу әдістемесін талдау

Бүгінгі таңда экологиялық проблемаларға байланысты тоңазытқыш жабдықтары нарығындағы тез болып жатқан өзгерістер жағдайында жабдықтың жаңа түрлерін бейімдеу немесе құру мәселесі туындайды. Тоңазытқыш өнеркәсібінің көптеген салаларында сұранысқа ие тоңазытқыш компрессоры температура мен қысымның кең диапазонында жаңа салқындатқыштарды қолдануға мүмкіндік беретін сапалық өзгерістерді қажет етеді. Бұл жұмыста спираль компрессорды математикалық модельдеудің кейбір көріністері қарастырылған. Көлемдік сығу принципі машиналарының жұмыс процестерін модельдеудің әр түрлі тәсілдері, олардың қолданбалы маңызы мен пайдалану басымдылықтары келтірілген. Саңылаулардың жіктелуін ескере отырып спираль компрессорға қатысты сығылатын ортаның ағып кетуін есептеу әдістемесіне аналитикалық шолу жүргізілген. Сығылатын ортаның ағып кетуіне әр түрлі факторлардың әсер етуіне байланысты саңылау қабырғаларының қозғалу жағдайын ескерудің есебінен рұқсат етілген жағдайлар мен осы әдістемені жетілдіру қажеттілігі туралы тұжырымдар жасалды. Сондай-ақ осы жағдайдың есептеу дәлдігі мен компрессордың жұмыс режимін оңтайлы таңдауға әсері туралы тұжырым жасалды. Түрлендірілген теңдеулер жүйесінде осы шартты ескеру жаңа үлгілерді жобалау кезінде спираль машиналардың жұмыс процестерін қолданбалы өлшеу дәлдігін жоғарылатуға мүмкіндік беретін мысалдар келтірілген.

Түйін сөздер: спираль компрессор, есептеу әдістемесі, математикалық модельдеу, жұмыс затының массалық шығыны, сығылатын ортаның ағып кетуі.

А.В. Кованов*, Д.В. Жигновская, В.А. Цветков, В.А. Пронин

Университет ИТМО, Россия, г. Санкт-Петербург, *e-mail: Kovanov76@yandex.ru

Спиральный компрессор. Анализ методик расчёта

Сегодня, в условиях стремительных изменений на рынке холодильного оборудования, связанных с экологическими проблемами, возникает проблема адаптации или создания новых типов оборудования. Спиральный холодильный компрессор, который так востребован во многих

областях холодильной промышленности, также требует качественных изменений, позволяющих использовать новые хладагенты в широком диапазоне температур и давлений. В работе рассмотрены некоторые аспекты математического моделирования спирального компрессора. Представлены различные подходы к моделированию рабочих процессов машин объёмного принципа сжатия, их прикладное значение и приоритет использования. Проведён аналитический обзор методик расчёта протечек компримируемой среды, применительно к спиральному компрессору, с учётом классификации щелей. Сделаны выводы о необходимости уточнения допущений и совершенствования данной методики за счёт учёта факта подвижности стенок щели, в зависимости от доли влияния различных факторов на протечки компримируемой среды. А также о влиянии данного факта на точность расчётов и оптимальный выбор рабочего режима компрессора. Приведены примеры, в которых учёт данного условия в преобразованных системах уравнений позволит повысить точность в прикладных расчётах рабочих процессов спиральных машин, при проектировании новых образцов.

Ключевые слова: спиральный компрессор, методика расчёта, математическое моделирование, массовый расход рабочего вещества, протечки компримируемой среды.

Introduction

Today, in the stream of rapid changes in the refrigeration equipment market related to environmental issues, the problem of adaptation or creation of new types of equipment arises. The refrigeration scroll compressor, which is so in demand in many areas of the refrigeration industry, also requires qualitative changes that allow the use of new refrigerants in a wide range of temperatures and pressures. So, the determining factor in the choice of a refrigeration compressor for operation at various operating modes is the possibility of smooth regulation of performance with a change in the degree of pressure increase of the working fluid, while maintaining the maximum efficiency indicators [1-3].

For the design of such samples, the development of the most adequate compressor model is required. Why is the concept of approximation of description used in the practice of mathematical modeling, which is characterized by the assumptions and assumptions adopted in its preparation? The choice and consideration of the factors affecting the operation of the compressor requires a balanced approach and should be based on the task set by the researcher, since the limited application of the developed model will depend on this [4–6]. Solved problems of increasing the efficiency of compressors of the volumetric principle of operation, inevitably touch upon the issues of thermo- and gas dynamics of working processes [7, 8]. The scroll compressor belongs to the volumetric type of machines and has leaks of the working fluid due to the contactless coupling of the working bodies. Working fluid leaks are the dominant losses that have a significant impact on its characteristics. So, in a number of studies, attention is paid to the

study of the feed rate, and the expressions obtained have an important applied nature [9]. However, statistics indicate a significant percentage of error in calculating the leakage of a compressible medium when using conventional techniques based on traditional approaches that allow the acceptance of the stationarity of the slot walls and do not take into account the loaded operating mode of the compressor. In this case, one has to ask about the possibility of full-scale use of classical models, or rather the calculation methods included in them, taking into account the accepted assumptions, for various operating modes of the compressor [10-12]. This fact undoubtedly requires an assessment of a sufficient degree of accuracy of calculations, and at the same time an analysis of the correspondence of the system of assumptions to the real processes of the scroll compressor operation. For this, special attention should be paid to the thermal and power factors in the loaded state of the compressor and the study of the influence of the mobility of the slot walls on the nature and dynamics of leaks, including these factors in the mathematical model. Having met this condition, we will be able to compare the accuracy of the calculations using various techniques, identifying the modes with the greatest discrepancy. Ultimately, expand the scope of the general model of scroll compressor workflows and improve its adequacy.

The methodology for calculating the working processes in the compressor should be built on the basis of an understanding of the real compression process, which can be described by a mathematical model, which is the basis for developing the methodology. In fact, the mathematical model reflects the sequential change in the states of the compressed medium and is, a set of relationships connecting the characteristics

of the system states with the system parameters. initial information, initial and boundary conditions in the presence of restrictions imposed on the functioning of the system; moreover, this set forms a mathematical object that is in a certain correspondence with the real system and can replace this system, so that the study gives new information about the processes occurring in the real system, or about the entire real system as a whole [13]. When simulating the working processes of positive displacement compressors, such relationships are the basic equations of thermodynamics, converted into differential equations for changing the parameters of the working fluid in the process. The integrity of the mathematical model should be considered from the standpoint of the presence of its constituents, such as: parameters and characteristics of the state of the system; background information; initial and boundary conditions; equations that specify the set of relationships between the characteristics of the state of the system and the listed elements of the mathematical model; information obtained by means of a mathematical model, etc. [14–16].

Analysis of the methodology for calculating work processes, as a set of methods and techniques that give the final result, can be carried out, in addition to assessing the integrity of the

(1

mathematical model, also from the standpoint of assessing: simplicity and completeness of the description of the real process; the degree of closeness to the description of the real process; limited application and adequacy of the model. In positive displacement compressors in general and scroll compressors in particular, work processes are performed with a variable mass of the working fluid. This is due to the filling and emptying of the working cavities in the processes of suction and discharge, as well as to the overflow of the compressed substance between the working cavities through the gaps. There are various approaches to the mathematical description of work processes in scroll compressors. In practice, for calculating processes with variable mass, three types of differential equations can be distinguished that describe the change in pressure and temperature in the considered thermodynamic system.

The paper presents a mathematical model based on a complete energy balance, which determines the heat fluxes between the refrigerant being compressed and the compressor elements used [17]. The complete energy balance has been established, the control volume method is applied. The work [18] presents a method for calculating the working process of a refrigeration scroll compressor, based on the following equations:

$$\begin{cases} \frac{dm_{ref}}{dt} = \sum \dot{m}_{in} - \sum \dot{m}_{in} \\ q_{ref} + \sum h_{in} \cdot \dot{m}_{in} = \frac{d}{dt} (m_{ref} \cdot u_{ref}) + p \frac{dV}{dt} + \sum h_{out} \cdot \dot{m}_{out} \end{cases}$$
(1)

The first of these equations is the mass balance equation in differential form, and the second is the energy conservation equation. The mass flow rate m is determined by passing the refrigerant through a diaphragm. To ensure efficient and reliable operation of the scroll compressor at high casing temperatures (relevant for SS compressors), it is necessary to provide certain openings during operation (i.e. after heating the machine) that cannot be predicted without a mathematical model of heat transfer from the main elements of the scroll compressor. In such cases, the mathematical model of the workflow is complemented by the mathematical model of heat transfer.

So, from the review of methods of thermodynamic analysis based on mathematical

modeling of the working process of positive displacement compressors, it can be seen that the most promising, differentiated and adequate method for calculating a scroll compressor is the method of mathematical modeling of working processes, in the general case based on the equations of thermodynamics of a variable mass body and the equation of state for gas. Considering this conclusion, first of all, it should be understood that the integrity of the mathematical model of the working process of the scroll machine (in particular, the scroll compressor), in turn, will depend on the integrity of the mathematical model that sets the method for calculating the loss of the compressed medium.
Methods

Based on the nature of our study, we chose a comparative method for its conduct, which in this case has obvious validity. At the first stage of the study, topical issues are identified in the field of modeling a scroll compressor, as a special case of machines of the volumetric principle of action. And shows the fundamental components of the integrity of the mathematical model for this area of knowledge.

At the second stage, we identified the approaches to the mathematical description of work processes most used in foreign practice, studied the reasons for this choice and the composition of the systems of equations. Because of a generalized analysis, equations were identified based on the description of work processes with a variable mass of the working fluid [19–21].

Having revealed this fact, we proceeded to the third stage of our work, at which the approaches to determining the leakage of a compressible medium in the working area of compressors of the volumetric principle of action were studied in a similar way. At the same time, we paid attention to which of these methods are of a real practical nature, what is the difference in methods, what is the percentage of error in the calculations. Together with this, we considered the issue of the outflow of the working medium through the movable slot. Note the aspects of the operating mode of spiral machines, in which this fact acquires the ability and it should be taken into account in calculating the leakage of a compressible substance [22,23].

We classify the slots in the scroll compressor and provide analytical data on the quality and quantity of the working substance overflow during the compression process, i.e., at different orbital angles of the spiral position. At the last stage, we analyzed and generalized the revealed facts. We made conclusions and assumptions.

Results and discussions

To date, a lot of theoretical and experimental material has been accumulated to determine the flow rate of the working substance through the gaps of the working elements of rotary machines. At the same time, as already seen in relation to the scroll compressor, the greatest losses from gloves through the radial clearances, to a lesser extent through the tangential clearances, the clearances themselves change during the operation of the compressor from force and thermal deformations. Moreover, the deformation of the spiral from gas forces is incomparably less than the deformations caused by the heating of the spiral.

The total differential of the change in the mass of the compressed medium in the working cavity can be represented:

$$dm_{i} = dm_{i+1} - dm_{i-1}, \qquad (2)$$

where dm_{i+1} – change in the mass of the compressible medium in the working cavity, associated with the overflow of the working fluid from the leading cavity; dm_{i-1} – change in the mass of the compressible medium in the working cavity, associated with the overflow of the working fluid from the considered cavity. The mass of the compressible substance flowing in or out of the working cavity through the slots between the working elements:

$$dm_i = \mu_i F_i W_i \rho_i d\tau , \qquad (3)$$

where μ_i – the coefficient of the flow rate of the working fluid through the slot; F_i is the area of the passage section of the slot; W_i is the adiabatic outflow rate; ρ_i is the density of the working substance in the cavity from which the compressible medium flows out; $d\tau$ is the period of time during which the expiration occurs. No generalizing dependences on the choice of values of the flow coefficient W_i for different types of slots at different parameters before and after the slot have been obtained so far.

In the design practice of positive displacement compressors, an equation is most often used to determine the mass of the overflowing working substance, which may be of practical interest.

$$m = \sqrt{\frac{\rho \cdot P_l l^2 \cdot \delta^2 \left[\left(\frac{P_2}{P_1}\right)^2 - l \right]}{ln \left(\frac{P_2}{P_1}\right)^2 + \xi + \lambda \Sigma}}, \quad (4)$$

где P₁, *T₁*, P₂, T₂ – параметры рабочего тела до и после щели; p1=P1/RT2 - плотность рабочего тела; R – газовая постоянная; l и δ – длина и минимальная высота щели; ξ – коэффициент, учитывающий местные сопротивления на входе и выходе из щели; λ – коэффициент трения компримируемого потока в шели: Σкоэффициент формы щели.

This formula takes into account the parameters of the working substance before and after the slot, the type of slot, the geometric dimensions of the slot, the length of the throttling path, the friction of the compressible flow, the losses at the inlet and outlet from a sudden narrowing or expansion. The calculations carried out by many researchers using this formula, in principle, have good quantitative agreement with the experimental data [24,25].

When carrying out calculations, the equation is written in the form:

$$\overline{m} = K_p F \sqrt{\frac{l}{RT_2} \left(P_2^2 - P_1^2\right)},$$
(5)

where $K_p = \frac{l}{\sqrt{ln(\frac{P_2}{P_1})^2 + \xi + \lambda \Sigma}}$ is the

dimensionless experimental flow rate.

 $F = \delta \cdot h$ – cross-sectional area of the slot; *h* is the height of the spiral.

The coefficient K_p takes into account the decrease in consumption due to losses during the movement of the working fluid through the slot. With known shapes and sizes of the slot, physical properties and parameters of the working fluid before and after the slot, the determination of the flow rate through the slot is reduced to the determination of the flow rate coefficient K_p .

Slit name	Slit configuration
Along the line of contact of the end of the feather of the spiral with the platform of another spiral (type a)	
Along the line of contact of the surfaces of the feathers of the spirals (type b)	R2 2 3
Along the line of contact of the end sections of the spirals (type c)	S S S S S S S S S S S S S S S S S S S
Along the line of contact of the end section and the surface of the feather of the spiral (type d)	22/2

Analysis of the literature on determining the flow rate in rotary compressors, which are the closest in the type of slots (see Table 1) and the principle of operation to scroll compressors, showed that this issue is most fully summarized in work [26]. The resistance parameter is determined by the formula:

$$S = \frac{b \cdot C_R}{2 \cdot \delta \cdot \sqrt{R_e}}, \qquad (6)$$

where C_R is the coefficient of resistance, taking into account the roughness of the walls of the slot,

determined by the function $C_R = f(Re)$; b is the depth of the slot.

The determination of the flow rates, according to [27], is carried out by the approximation method, which complicates the use of this method in the numerical solution of the system of differential equations. The implementation of the considered methodological approach is carried out in a computational program and is possible only with

Table 1 – Type of slot:	n a scroll compressor
-------------------------	-----------------------

obtaining the following analytical dependences: the C_R coefficient on the Reynolds number and the consumption coefficient Kp on the parameter S, which, as noted above, are presented in [27] in the form of graphical dependencies. For this purpose, these graphs can be approximated by the design equations presented below. It should be noted that to improve the accuracy of the calculation, the dependencies are divided into intervals.

So, the dependence of the C_R coefficient on the Re number is represented by the following equations:

$$\begin{split} R_e &= 42.148 \div 300 \rightarrow C_R = -2.1632 \cdot \ln(R_e) + 18.256; \\ R_e &= 300 \div 500 \rightarrow C_R = 125.99 \cdot R_e^{-0.5437}; \\ R_e &= 500 \div 2000 \rightarrow C_R = 100.17 \cdot R_e^{-0.5119} + 0.015; \\ R_e &= 2000 \div 2500 \rightarrow C_R = 0.0166 \cdot R_e^{-0.6338}; \\ R_e &= 2500 \div 10000 \rightarrow C_R = 0.4274 \cdot \ln(R_e) - 0.8754; \end{split}$$

The dependence of the flow rate K_p on the parameter *S* when using the specific critical flow rate of the compressible medium q_{KP} in the calculation of the Reynolds number is represented by the following equations:

$$S = 0 \div 5 \to K_p = -0.1078 \cdot ln(S) + 0.4985;$$

$$S = 5 \div 20 \to K_p = 0.4443 \cdot e^{-0.0625S};$$

$$S = 20 \div 50 \to K_p = 0.262 \cdot S - 0.2503 - 0.001;$$

$$S = 50 \div 100 \to K_p = 0.1037 - 0.00003 \cdot S;$$

The dependence of the flow rate K_p on the parameter *S* when using the specific second flow rate of the compressible medium *q* in the calculation of the Reynolds number is represented by the following equations:

$$\begin{split} S &= 0 \div 0.144 \to K_p = -0.1032 \cdot \ln(S) + 0.501; \\ S &= 0.144 \div 2 \to K_p = 0.5418 \cdot S^{-0.119}; \\ S &= 2 \div 10 \to K_p = 0.6309 \cdot S^{-0.3114} - 0.002; \\ S &= 10 \div 25 \to K_p = 0.9888 \cdot S^{-0.5177}; \\ S &= 25 \div 30 \to K_p = 0.6808 \cdot S^{-0.4007}; \\ S &= 30 \div 200 \to K_p = 0.2225 \cdot S^{-0.0735}; \end{split}$$

This approach, together with the developed calculation subroutine, can significantly reduce the

time when calculating the working process of the scroll compressor and eliminate the possibility of mechanical errors when using graphic material. In a scroll vacuum pump, in contrast to a scroll compressor, the flow through the clearances due to pressure changes can vary from viscous through transient to molecular. Taking this into account, when studying foreign works [28,29] in this area, the proposed general equation, which is equally applicable for three different flow regimes, may be of interest. Here, the overflows through the slotted channel are found using the formula for a flat rectangular slot, in particular, from the Navier-Stokes formula for the viscous (laminar) regime:

$$Q_{S} = -\frac{h\delta_{p}^{3}}{12\eta} \cdot \rho \frac{dp}{dx} + \frac{h\delta_{p}^{2}}{2\eta} \cdot \rho \lambda \left(\frac{2}{\sigma_{V}} - I\right) \frac{dp}{dx}, \quad (7)$$

where $\lambda = \frac{kT}{\sqrt{2\pi\sigma^2 p}}$ – is the average free path of

molecules.

To improve the accuracy, an expression with three coefficients was proposed, which is presented in the form:

$$Q_{S} = -\exp\left(\frac{-C_{i}\pi s}{1.488\lambda}\right)C_{2}Q_{m} + \left[1 - \exp\left(\frac{-C_{i}\pi s}{1.488\lambda}\right)\right](Q_{V} + C_{3}Q_{ps}), \qquad (8)$$

where empirical coefficients $C_1 = 10$, $C_2 = 1,86$,

$$C_3 = 1,5, \qquad Q_V = -\frac{h\delta_p^3}{12\eta} \cdot \rho \frac{dp}{dx} \qquad \text{and}$$

$$Q_{ps} = \frac{h\delta_p^2}{2\eta} \cdot \rho \lambda \left(\frac{2}{\sigma_v} - I\right) \frac{dp}{dx}.$$

The disadvantages of this technique include the fact that the empirical coefficients C_1 , C_2 , C_3 were obtained for slits of specific sizes and geometry. The possibility of using these coefficients for slots with other spiral sizes and gaps was not considered. The presented methods also require solving differential equations for calculating conductivity.

The most interesting approach was proposed in [30-32], where a dependence was obtained for determining the mass flow rate of the working substance through the slot, taking into account the wall mobility. Mass flow is presented as

$$G = \frac{P_i F}{\sqrt{R_r T_i}} \frac{q}{q}, \qquad (9)$$

where $\overline{q} = f(v,\tau)$ is the flow coefficient – a function determined by numerical methods, which depends on the ratio of the pressures at the ends of the slot and the slot parameter U, which is equal to

$$\mathcal{G} = \frac{5l\eta\sqrt{R_rT_i}}{\delta^2 P_i},\tag{10}$$

where *l* is the length of the channel in the direction of flow of the compressed medium.

Thus, formulas (9), (10) are applicable only for a flat rectangular slot. But in works [33, 34] it was proposed to use this technique for calculating the mass flow rate of a gas-oil mixture when flowing through channels of variable cross-section. For this, the equivalent channel length, determined from the condition of channel expansion to 4δ , is substituted into equation (10) instead of *l*. An obvious drawback of this technique is that the transition to an equivalent channel was carried out by processing experimental data for the flow of a gas-oil mixture, which can introduce a significant error in determining the mass flow rate of a pure working substance, especially when varying the dimensions of the channel.

The technique for determining the leakage of a compressed medium, as the flow of a viscous flow in slots with movable walls, was further developed in the works of Pronin V.A. [35,36]. Here, two mathematical models have been developed for calculating the flow rate of the compressed medium through the slots formed by the working bodies of a single-rotor screw compressor, taking into account the mobility of their walls. The following were used: the equation of continuity for the unsteady flow of a compressible medium, the equation of unsteady motion of a continuous medium and the equation of conservation of energy in a form that is valid for a real gas. When solving the problem, it was assumed that the height of the slots is small compared to their depth, and the flow of the medium is laminar (viscous). This approach gave good agreement with the experimental data obtained in a wide range of temperatures and pressures for R717. The validity of the data should be considered primarily for a single rotor screw compressor. It should be taken into account and taken into account the fact that in the

region of low pressures the mobility of the walls affects the flow of the working substance much more strongly, this is described by the authors in [37], devoted to rotary vacuum pumps, including spiral type.

The use of widely known, in compressor technology, methods for calculating the mass flow rate of a working fluid in slotted channels, which were mentioned earlier, in a number of cases can lead to significant errors. The need to use graphical dependencies to determine the coefficients included in the equations and various formulas, depending on the type of slot, also create inconvenience in calculations. The graphs shown may not cover the pressure ranges. With different required combinations of radii R_1 , R_2 , types of slit and gap, the calculation of the conductivity gives an underestimation from 10% to 3 times in comparison with the experimental data. Moreover, the error grows with decreasing channel length. Analyzing the leaks through slots of various shapes of rotary compressors, we can assume an interesting formulation for calculating the flow rate of the working fluid through the slots using the dependence of the friction coefficient on the Reynolds number.

Conclusion

Thus, we can conclude that at present, in most of the works devoted to the study of scroll compressors, a technique is used to calculate the loss of a compressed medium with the assumption that the walls of the slot are stationary. However, studies in some works obtained using the model and its correlation with experimental data cast doubt on this assumption. Moreover, one should take into account the calculation error and the relative laboriousness of these methods.

Based on the nature of the movement of the working fluid and its interaction with the working organs of the scroll compressor during overflows, we can talk about the presence of both a passing movement, when the flow rate of the working substance increases, as well as a counter movement of the wall and working substance, when its consumption decreases. If, at the same time, we take into account the dynamics of the compressor operation, spiral deformations, which change the gap during operation, and a number of other factors, then the quantitative issue of leakages is far from unambiguous, being very promising for research.

References

1 Troup A.P., Dennis N.T.M. Six years of «dry pumping»: A review of experience and issues //J. Vac. Sci. Technol. A Vacuum, Surfaces, Film. – 1991. – Vol. 9, № 3. – P. 2048-2052.

2 Lessard P.A. Dry vacuum pumps for semiconductor processes: Guidelines for primary pump selection // J. Vac. Sci. Technol. A Vacuum, Surfaces, Film. – 2000. – Vol. 18, № 4. – P. 1777-1781.

3 Yue X.-J., Lu Y., Zhang Y.-L., Ba D., Wang G.-Y., Zhang Z. Computational fluid dynamics simulation study of gas flow in dry scroll vacuum pump // Vacuum. – 2015. – Vol. 116. – P. 144-152.

4 Sawada T., Kamada S., Sugiyama W., Takemoto J., Haga S., Tsuchiya M. Experimental verification of theory for the pumping mechanism of a dry-scroll vacuum pump // Vacuum. – 1999. – Vol. 53, № 1–2. – P. 233-237.

5 Yue X., Zhang Y., Su Z., Ba D., Wang G., Zhang Z. CFD-based analysis of gas flow in dry scroll vacuum pump // Vacuum. – 2017. – Vol. 139. – P. 127-135.

6 Jianmei F., Qingqing Z., Tianfang H., Xueyuan P. Dynamics characteristics analysis of the oil-free scroll hydrogen recirculating pump based on multibody dynamics simulation //Int. J. Hydrogen Energy. -2021. - Vol. 46, $N \circ 7. - P. 5699-5713$.

7 Zheng S., Wei M., Song P., Hu C., Tian R. Thermodynamics and flow unsteadiness analysis of trans-critical CO2 in a scroll compressor for mobile heat pump air-conditioning system // Appl. Therm. Eng. – 2020. – Vol. 175. – P. 115368.

8 Zheng S., Wei M., Hu C., Song P., Tian R. Flow characteristics of tangential leakage in a scroll compressor for automobile heat pump with CO2 // Sci. China Technol. Sci. – 2021. – Vol. 64, № 5. – P. 971-983.

9 Zhang Y.F., Ji Z.H., Liu J.Y., Xiong S.S., Huang X.B., Mao B.T., Guo B.S., Ying Z.C., Sun Y.B. Study on Mathematical Model in Working Process of Automotive Air Conditioning Scroll Compressor // Appl. Mech. Mater. – 2015. – Vol. 741. – P. 572-576.

10 Sun Z., Wang B., Zheng X., Kawakubo T., Tamaki H., Numakura R. Effect of bent inlet pipe on the flow instability behavior of centrifugal compressors // Chinese J. Aeronaut. -2020. - Vol. 33, No 8. - P. 2099-2109.

11 Deng Y., Miao N., Wu D., Liu Y., Zhai X., Tong J. A new high-pressure clearance seal with flexible laddered piston assembly in oil-free miniature compressor for potential hydrogen applications and investigation on its dynamic sealing efficiency // Int. J. Hydrogen Energy. -2019. -Vol. 44, No 45. -P. 24856-24866.

12 Ma C., Yang Z., Jiao K., Liu Z., Du Q. Multi-objective optimization of the centrifugal compressor impeller in 130 kW PEMFC through coupling SVM with NSGA -III algorithms // Int. J. Green Energy. – 2021. – P. 1-13.

13 Hablanian M.H. The emerging technologies of oil-free vacuum pumps // J. Vac. Sci. Technol. A Vacuum, Surfaces, Film. – 1988. – Vol. 6, № 3. – P. 1177-1182.

14 Lu Y., Kovacevic A., Read M., Basha N. Numerical Study of Customised Mesh for Twin Screw Vacuum Pumps // Designs. – 2019. – Vol. 3, № 4. – P. 52.

15 Basha N., Kovacevic A., Rane S. Numerical investigation of oil injection in screw compressors // Appl. Therm. Eng. – 2021. – Vol. 193. – P. 116959.

16 Kovacevic A., Rane S. Challenges in 3D CFD Modelling of Rotary Positive Displacement Machines // J. Phys. Conf. Ser. – 2021. – Vol. 1909, № 1. – P. 012063.

17 Ma X., Zhang C., Li K. Hybrid modeling and efficiency analysis of the scroll compressor used in micro compressed air energy storage system // Appl. Therm. Eng. - 2019. - Vol. 161. - P. 114139.

18 Li Z., Li L., Zhao Y., Bu G., Shu P., Liu J. Test and analysis on the working process of dry scroll vacuum pump // Vacuum. – 2010. – Vol. 85, № 1. – P. 95-100.

19 Sriveerakul T., Aphornratana S., Chunnanond K. Performance prediction of steam ejector using computational fluid dynamics: Part 1. Validation of the CFD results // Int. J. Therm. Sci. – 2007. – Vol. 46, № 8. – P. 812-822.

20 Djajadiwinata E., Sadek S., Alaqel S., Orfi J., Al-Ansary H. Numerical and One-Dimensional Studies of Supersonic Ejectors for Refrigeration Application: The Significance of Wall Pressure Variation in the Converging Mixing Section // Appl. Sci. -2021. - Vol. 11, N_{2} 7. - P. 3245.

21 Metin C., Gök O., Atmaca A.U., Erek A. Numerical investigation of the flow structures inside mixing section of the ejector // Energy. – 2019. – Vol. 166. – P. 1216-1228.

22 Ali Faghih Aliabadi M., Zhang G., Dykas S., Li H. Control of two-phase heat transfer and condensation loss in turbine blade cascade by injection water droplets // Appl. Therm. Eng. – 2021. – Vol. 186. – P. 116541.

23 Aliabadi M.A.F., Lakzian E., Jahangiri A., Khazaei I. Numerical investigation of effects polydispersed droplets on the erosion rate and condensation loss in the wet steam flow in the turbine blade cascade // Appl. Therm. Eng. -2020. - Vol. 164. - P. 114478.

24 Zhang Q., Feng J., Wen J., Peng X. 3D transient CFD modelling of a scroll-type hydrogen pump used in FCVs // Int. J. Hydrogen Energy. – 2018. – Vol. 43, № 41. – P. 19231-19241.

25 Fox S., Collins R., Boxall J. Experimental Study Exploring the Interaction of Structural and Leakage Dynamics // J. Hydraul. Eng. – 2017. – Vol. 143, № 2. – P. 04016080.

26 Stosic N. Screw Compressors. - Berlin/Heidelberg: Springer-Verlag, 2005.

27 Kovacevic A., Stosic N., Smith I. Screw Compressors. - Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2007.

28 Li Z., Li L., Zhao Y., Bu G., Shu P. Theoretical and experimental study of dry scroll vacuum pump // Vacuum. – 2009. – Vol. 84, № 3. – P. 415-421.

29 Su Y., Sawada T., Takemoto J., Haga S. Theoretical study on the pumping mechanism of a dry scroll vacuum pump // Vacuum. -1996. - Vol. 47, N 6–8. - P. 815-818.

30 Tyurin A. V., Burmistrov A. V., Salikeev S.I., Raykov A.A., Fomina M.G. Study of oil free scroll vacuum pump characteristics // Vak. Forsch. und Prax. – 2020. – Vol. 32, № 6. – P. 42-44.

31 Raykov A., Burmistrov A., Salikeev S., Fomina M. Scroll Geometry of Scroll Vacuum Pump // Vak. Forsch. und Prax. -2018. - Vol. 30, № 6. - P. 24-27.

32 Burmistrov A., Salikeev S., Raykov A., Fomina M. Mathematical model of working process of oil free scroll vacuum pump // Vak. Forsch. und Prax. - 2017. - Vol. 29, № 6. - P. 28-31.

33 Li T., Wang J., Lei S., Zhang W., Ren Z. Structural characteristics of twin-screw compressor rotor based on thermal-solid coupling method // J. Vibroengineering. - 2020. - Vol. 22, № 6. - P. 1534-1546.

34 Cao F., Gao T., Li S., Xing Z., Shu P. Experimental analysis of pressure distribution in a twin screw compressor for multiphase duties // Exp. Therm. Fluid Sci. - 2011. - Vol. 35, № 1. - P. 219-225.

35 Minikaev A., Yerezhep D., Zhignovskaia D., Pronin V., Kovanov A. Power interactions of scroll compressor elements // IOP Conf. Ser. Mater. Sci. Eng. - 2020. - Vol. 826. - P. 012022.

36 Pronin V.A., Kuznetsov Y.L., Zhignovskaia D.V., Minikaev A.F., Yerezhep D. Improving methodology calculating the leakages compressible environment in the working part of a screw compressor // AIP Conference Proceedings. - 2019. - Vol. 2141. – P. 030010.

37 Yan C., Liu J., Zheng S., Huang B., Dai J. Study on the Effects of the Wear-Rings Clearance on the Solid-Liquid Two-Phase Flow Characteristics of Centrifugal Pumps // Symmetry (Basel). - 2020. - Vol. 12, № 12. - P. 2003.

References

- 1 A. P. Troup and N. T. M. Dennis, J. Vac. Sci. Technol. A Vacuum, Surfaces, Film 9, 2048–2052 (1991).
- P. A. Lessard, J. Vac. Sci. Technol. A Vacuum, Surfaces, Film 18, 1777-1781 (2000). 2
- 3 X.-J. Yue, Y. Lu, Y.-L. Zhang, D. Ba, G.-Y. Wang, and Z. Zhang, Vacuum 116, 144–152 (2015).
- 4 T. Sawada, S. Kamada, W. Sugiyama, J. Takemoto, S. Haga, and M. Tsuchiya, Vacuum 53, 233–237 (1999).
- 5 X. Yue, Y. Zhang, Z. Su, D. Ba, G. Wang, and Z. Zhang, Vacuum 139, 127-135 (2017).
- F. Jianmei, Z. Qingqing, H. Tianfang, and P. Xueyuan, Int. J. Hydrogen Energy 46, 5699-5713 (2021). 6
- S. Zheng, M. Wei, P. Song, C. Hu, and R. Tian, Appl. Therm. Eng. 175, 115368 (2020).
- S. Zheng, M. Wei, C. Hu, P. Song, and R. Tian, Sci. China Technol. Sci. 64, 971-983 (2021). 8
- Y. F. Zhang, Z. H. Ji, J. Y. Liu, S. S. Xiong, X. B. Huang, B. T. Mao, B. S. Guo, Z. C. Ying, and Y. B. Sun, Appl. Mech. Mater. 741, 572-576 (2015).
 - 10 Z. Sun, B. Wang, X. Zheng, T. Kawakubo, H. Tamaki, and R. Numakura, Chinese J. Aeronaut. 33, 2099–2109 (2020).
 - Y. Deng, N. Miao, D. Wu, Y. Liu, X. Zhai, and J. Tong, Int. J. Hydrogen Energy 44, 24856–24866 (2019). 11
 - 12 C. Ma, Z. Yang, K. Jiao, Z. Liu, and Q. Du, Int. J. Green Energy, 1–13 (2021).
 - 13 M. H. Hablanian, J. Vac. Sci. Technol. A Vacuum, Surfaces, Film. 6, 1177-1182 (1988).
 - Y. Lu, A. Kovacevic, M. Read, and N. Basha, Designs 3, 52 (2019) 14
 - 15 N. Basha, A. Kovacevic, and S. Rane, Appl. Therm. Eng. 193, 116959 (2021).
 - A. Kovacevic and S. Rane, J. Phys. Conf. Ser. 1909, 012063 (2021). 16
 - 17 X. Ma, C. Zhang, and K. Li, Appl. Therm. Eng. 161, 114139 (2019).
 - Z. Li, L. Li, Y. Zhao, G. Bu, P. Shu, and J. Liu, Vacuum 85, 95-100 (2010). 18
 - 19 T. Sriveerakul, S. Aphornratana, and K. Chunnanond, Int. J. Therm. Sci. 46, 812-822 (2007).
 - E. Djajadiwinata, S. Sadek, S. Alaqel, J. Orfi, and H. Al-Ansary, Appl. Sci. 11, 3245 (2021). 20
 - C. Metin, O. Gök, A. U. Atmaca, and A. Erek, Energy 166, 1216-1228 (2019). 21
 - 22 M. Ali Faghih Aliabadi, G. Zhang, S. Dykas, and H. Li, Appl. Therm. Eng. 186, 116541 (2021).
 - 23 M. A. F. Aliabadi, E. Lakzian, A. Jahangiri, and I. Khazaei, Appl. Therm. Eng. 164, 114478 (2020).
 - Q. Zhang, J. Feng, J. Wen, and X. Peng, Int. J. Hydrogen Energy 43, 19231-19241 (2018). 24
 - 25 S. Fox, R. Collins, and J. Boxall, J. Hydraul. Eng. 143, 04016080 (2017)
 - 26 N. Stosic, Screw Compressors (Springer-Verlag, Berlin/Heidelberg, 2005).
 - 27 A. Kovacevic, N. Stosic, and I. Smith, Screw Compressors (Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2007).
 - 28 Z. Li, L. Li, Y. Zhao, G. Bu, and P. Shu, Vacuum 84, 415-421 (2009).
 - 29 Y. Su, T. Sawada, J. Takemoto, and S. Haga, Vacuum 47, 815-818 (1996).
 - 30 A. V. Tyurin, A. V. Burmistrov, S. I. Salikeev, A. A. Raykov, and M. G. Fomina, Vak. Forsch. und Prax. 32, 42-44 (2020).
 - A. Raykov, A. Burmistrov, S. Salikeev, and M. Fomina, Vak. Forsch. und Prax. 30, 24-27 (2018). 31
 - A. Burmistrov, S. Salikeev, A. Raykov, and M. Fomina, Vak. Forsch. und Prax. 29, 28-31 (2017). 32
 - 33 T. Li, J. Wang, S. Lei, W. Zhang, and Z. Ren, J. Vibroengineering 22, 1534–1546 (2020).
 - 34
 - F. Cao, T. Gao, S. Li, Z. Xing, and P. Shu, Exp. Therm. Fluid Sci. 35, 219–225 (2011). A. Minikaev, D. Yerezhep, D. Zhignovskaia, V. Pronin, and A. Kovanov, IOP Conf. Ser. Mater. Sci. Eng. 826, 012022 35

(2020)

- V. A. Pronin, Y. L. Kuznetsov, D. V. Zhignovskaia, A. F. Minikaev, and D. Yerezhep, AIP Conf. Proc. 2141, (2019). 36
- C. Yan, J. Liu, S. Zheng, B. Huang, and J. Dai, Symmetry (Basel). 12, 2003 (2020). 37

IRSTI 29.19.11, 47.09.48

https://doi.org/10.26577/RCPh.2021.v78.i3.05



¹L.N. Gumilyov Eurasian National University, Kazakhstan, Nur-Sultan ²The Institute of Nuclear Physics of Republic of Kazakhstan, Kazakhstan, Almaty *e-mail: kayrat.kadyrzhanov@mail.ru

STUDY OF PHASE FORMATION IN FE_2O_3 -ND $_2O_3$ \rightarrow NDFEO $_3/FE_2O_3$ NANOCOMPOSITES AS A RESULT OF THERMAL ANNEALING

The aim of this work is systematic study of the thermal annealing effect on the preparation of nanostructured composites $NdFeO_3/Fe_2O_3$ with a spinel type structure. The interest in these nanocomposites is due to the enormous potential of their application as a basis for magnetic devices, catalysts, and magnetic carriers for targeted drug delivery. As a synthesis method, two-stage synthesis was used, which includes mechanochemical grinding of nanopowders Fe_2O_3 and Nd_2O_3 in a planetary mill, followed by thermal annealing of the resulting mixture in a wide temperature range: 600-1000 °C. During the studies carried out, it was found that in the initial state the obtained nanocomposites are a mixture of a solid solution of interstitial and substitutional Fe_2O_3 and Nd_2O_3 . At an annealing temperature of 600 °C, the onset of the formation of the NdFeO₃ phase is observed, which at a temperature of 1000 °C is fully formed and dominates in the composite structure (content more than 85%). It was also found that during thermal sintering, the processes of phase transformations of the Fe₂O₃-Nd₂O₃ →NdFeO₃/Fe₂O₃ type are accompanied by an increase in the particle size by a factor of 1.5-2.

Key words: spinel, Fe_2O_3 -Nd $_2O_3$ -Nd FeO_3/Fe_2O_3 , nanocomposites, catalysts, thermal annealing, phase formation.

Е.Б. Егизбек^{1,2}, К.К. Кадыржанов^{1*} ¹Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Қазақстан, Нұр-Сұлтан қ. ²Қазақстан Республикасының Ядролық физика институты, Қазақстан, Алматы қ. *e-mail: kayrat.kadyrzhanov@mail.ru

Fe₂O₃-Nd₂O₃→NdFeO₃/Fe₂O₃ нанокомпозиттеріндегі термиялық өңдеудің нәтижесінде фазалық құрылуды зерттеу

Бұл жұмыстың мақсаты – шпинель типті құрылымы бар NdFeO₃ / Fe₂O₃ нано құрылымды композиттерді алуға термиялық өңдеудің әсерін жүйелі түрде зерттеу болып табылады. Бұл нанокомпозиттерге деген қызығушылық оларды магниттік құрылғылардың, катализаторлардың және дәрі-дәрмектерді мақсатты түрде жеткізуге арналған магниттік тасымалдағыштардың негізі ретінде қолданудың үлкен әлеуетіне байланысты. Бұл жұмысты синтез әдісі ретінде екі сатылы синтез қолданылды, оның ішінде Fe₂O₃ және Nd₂O₃ нано ұнтақтарын планетарлық диірменде механохимиялық ұнтақтау, содан кейін алынған қоспаны кең температуралық диапазонында: 600 – 1000 °C – термиялық күйдіру өткізілді. Жүргізілген зерттеулер барысында бастапқы күйде алынған нано композиттер – Fe₂O₃ және Nd₂O₃ ену және алмастырғыш қатты ерітінді қоспасы түрінде болатыны анықталды. Және де өңдеу температурасы 600 °C кезінде NdFeO₃ фазасының түзілуінің басталуы байқалып, ал 1000 °C температурада композиттің құрылымында толық қалыптасады және үстемдік ететіні (құрамы 85 %-дан жоғары) байқалды. Сондай-ақ, термиялық қақтау кезінде Fe₂O₃-Nd₂O₃→NdFeO₃/ Fe₂O₃ типті фазалық түрлену процестері бөлшектердің өлшемдерінің 1,5 – 2 есе ұлғаюымен қатар жүретіндігі анықталды.

Түйін сөздер: шпинель, Fe₂O₃-Nd₂O₃→NdFeO₃/Fe₂O₃, нанокомпозиттер, катализаторлар, термиялық өңдеу, фазалық құрылу.

Е.Б. Егизбек^{1,2}, К.К. Кадыржанов^{1*} ¹Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Казахстан, г. Нур-Султан ²Институт ядерной физики МЭ РК, Казахстан, г. Алматы *e-mail: kayrat.kadyrzhanov@mail.ru

Изучение фазообразования в нанокомпозитах Fe₂O₃-Nd₂O₃→NdFeO₃/Fe₂O₃ в результате термического отжига

Целью данной работы является систематическое изучение влияния термического отжига на получение наноструктурных композитов NdFeO₃ / Fe₂O₃ со шпинельного типа структурой. Интерес к данным нанокомпозитам обусловлен огромным потенциалом их применения в качестве основы для магнитных устройств и катализаторов, а также и магнитных носителей для адресной доставки различных лекарств. В качестве метода синтеза в работе использовался двухэтапный синтез, включающий в себя механохимическое перемалывание нанопорошков Fe₂O₃ и Nd₂O₃ в планетарной мельнице, далее с последующим термическим отжигом полученной смеси в широком диапазоне температур 600 – 1000 °C. В ходе проведенных исследований установлено, что в исходном состоянии полученные нанокомпозиты представляют собой смесь твердого раствора внедрения и замещения Fe₂O₃ и Nd₂O₃. При температуре отжига 600°C наблюдается начало формирование фазы NdFeO₃, которая при температуре 1000 °C является полностью сформированной и доминирует в структуре композита (содержание более 85 %). Также установлено, что при термическом спекании, процессы фазовых превращений типа Fe₂O₃ – Nd₂O₃ — NdFeO₄/Fe₂O₃ сопровождаются увеличением размеров частиц в 1,5-2 раза.

Ключевые слова: шпинель, Fe₂O₃-Nd₂O₃→NdFeO₃/Fe₂O₃, нанокомпозиты, катализаторы, термический отжиг, фазообразование.

Introduction

One of the promising areas of research in modern materials science is the study of the kinetics of phase transformations in nanostructured materials under the influence of external factors [1-3]. Interest in this area is due to the need to obtain new data on the processes of phase formation in nanomaterials, which have significant differences from bulk analogs, and can also be accompanied not only by phase transformations and changes in structural characteristics, but also by significant changes in morphological parameters, consisting in a change in the shape of nanoparticles. their density and porosity. At the same time, in the case of nanostructured materials, in most cases, the formation of new phases occurs under significantly different conditions from similar massive samples [4,5]. This is primarily due to small particle sizes, which lead to the fact that a large number of structural metastable distortions and deformations occur in the structure, which under external factors can lead to an acceleration of phase transformation processes. In this regard, the study of such processes, as well as obtaining new data on the dynamics of phase transformations, as well as the possibility of obtaining nanocomposite structures is of great interest not only from a fundamental point of view, but also of great potential in industrial application [6-10].

Among the wide variety of magnetic nanostructures, structures based on iron oxide doped with other magnetic components, such as nickel, cobalt, or neodymium, are of particular interest [11-15]. Interest in these types of structures is due to their unique magnetic properties, which, as is known, directly depend on the structural characteristics, including the degree of ordering, and phase composition. Also of interest are spineltype structures of the ABO, type, where A is the magnetic component of the dopant and B is iron [16-20]. Such structures have great potential for application not only in biomedicine, as a basis for magnetic resonance spectroscopy, targeted drug delivery, but also in catalysis, purification of aqueous media, magnetic sensors, etc. In this case, the choice of neodymium as component A in most cases plays an important role both in the magnetic performance of nanoparticles and in the increase in the adsorption capacity of nanocomposites, which are increasingly used as adsorbents or as a basis for catalysts for the purification and disposal of harmful compounds and heavy metals from aqueous media. [21-25].

Summarizing all of the above, this study aimed at studying the dynamics of phase transformations in nanocomposites Fe_2O_3 -Nd $_2O_3$ \rightarrow NdFeO $_3$ /Fe $_2O_3$, the ultimate goal of which is to obtain spinel-type NdFeO $_3$ structures, is one of the topical trends in the development of nanomaterials science, and the data obtained on phase transformations and methods of obtaining nanostructures NdFeO $_3$ can later be used for semi-industrial applications.

Experimental part

To obtain NdFeO₃/Fe₂O₃ nanocomposites, a two-stage synthesis technique was used, including the mechanochemical mixing of two Fe₂O₃ and Nd₂O₃ powders in a planetary mill for 1 hour at a grinding speed of 400 rpm. The grinding temperature mode did not exceed 50°C, in order to avoid the initiation of phase transformation processes during mixing. The second stage consisted in isochronous thermal annealing of the resulting mixture in the temperature range of 600-1000°C in the atmosphere for 5 hours, followed by cooling together with the furnace for 24 hours. After annealing, the resulting nanocomposites were placed in plastic containers to avoid oxidation and air degradation processes.

The assessment of morphological features was carried out using scanning electron microscopy implemented using scanning electron microscopy Jeol 7500F.

The dynamics of nanocomposites phase transformations was studied on a D8 Advance ECO powder diffractometer (Bruker). X-ray diffraction patterns were recorded in the Bragg-Brentano geometry, in the angular range 2θ =20-80° with a step of 0.03°, Cu-K λ =1.54 Å.

Results and discussion

Figure 1 shows the results of a study of the morphological features of synthesized nanocomposites, depending on the annealing temperature. As can be seen from the presented SEM images of the initial nanocomposites, after grinding, the structure of the composites is represented by particles of various irregular shapes, covered with a thin porous layer, the presence of which is caused by the processes of grinding and rubbing. In turn, annealing at a temperature of 600°C leads to the formation of stuck together fused agglomerates of particles, the size of which varies from several hundred nanometers to several microns. The agglomerates themselves consist of particles, the size of which varies from 10 to 30 nm. Further annealing of the samples at a temperature of 800°C leads to the formation of spherical or sphere-like particles, the size of which varies from 20 to 50 nm. At a temperature of 1000°C, an increase in particle sizes to 50-70 nm is observed, with the formation of large dendritic-type clusters. In this case, in contrast to the samples in the initial state, the nanoparticles obtained at temperatures of 800°C and 1000°C have a denser structure, without visible cracks or porous inclusions, which indicates

a high degree of structural ordering and an increase in the strength properties of nanocomposites.

The assessment of structural changes, as well as the dynamics of phase transformations as a result of thermal annealing, was carried out using the method of X-ray phase analysis, the results of which are shown in Figure 2. The general view of the obtained diffraction patterns indicates a polycrystalline structure of the synthesized structures, and the low intensity of reflections and their broadened shape indicate nanoscale dimensions of X-ray diffraction patterns. At the same time, the general appearance of changes in diffraction patterns depending on the annealing temperature, characterized by the formation of new reflexes, as well as a change in their shape and intensity, indicates the process of phase transformations as a result of annealing.

During analysis of the initial sample, it was found that after mechanochemical grinding, according to X-ray phase analysis, the structure of the initial composite is a mixture of two phases: cubic neodymium oxide (Nd_2O_3) and a rhomboid phase of hematite (Fe_2O_3) in a content close to 1:1. At the same time, the position and shape of diffraction reflexes for both phases is characteristic of highly disordered structures with a high content of an amorphous-like fraction. This type of structure, characteristic of an interstitial or substitutional solid solution, is most likely for the selected synthesis conditions, and the high content of the amorphous fraction is caused by the grinding processes and partial destruction of phases during the synthesis.

The most characteristic method for increasing the crystallinity degree, as well as for the formation of spinel structures of the NdFeO, type, is the method of thermal annealing, which makes it possible not only to increase the degree of structural ordering, but also to initiate phase transformation processes. Analysis of the obtained diffraction patterns of samples under study annealed at a temperature of 600-1000°C showed that with an increase in temperature, the main changes in the diffraction patterns are associated with the appearance of new reflections at $2\theta = 24 - 26^{\circ}$ and $2\theta = 33 - 36^{\circ}$, the intensity of which increases with an increase in temperature. At the same time, the main peak at $2\theta=33-34^{\circ}$ is shifted and divided into two maxima characteristic of the NdFeO₃ and Fe₂O₃ phases. At an annealing temperature of 600°C, the onset of the formation of the NdFeO, phase with the partial displacement of the Nd₂O₃ phase is observed (see Figure 3). An increase in the annealing temperature to 800°C leads to the complete transformation of the Nd₂O₃ phase into the NdFeO₃ phase, with the presence of the Fe₂O₃ phase, the content of which is no more than 25%. This transformation occurs due to the fact that under the influence of temperature, an increase in thermal vibrations of the lattice, as well as annealing of point defects, leads to the processes of the incorporation of iron into the lattice sites of Nd₂O₃ with the subsequent formation of the orthorhombic phase NdFeO₃ of the spatial system Pnma(62). The complete formation of the NdFeO₃ phase occurs at a temperature of 1000°C, with a small content of the hematite phase (no more than 11%). As is known from the literature [26,27], the hematite phase is re-

sistant to annealing in the temperature range 600-1000°C, which is characterized by the processes of thermal annealing of point defects and vacancies. In this range of annealing temperatures, the hematite structure is ordered and becomes stable. In this case, the NdFeO₃ phase in its structural formula is close to the hematite phase, with only one difference, which consists in the substitution of a neodymium atom for an iron atom. Therefore, the observed structural ordering, characterized not only by a change in the shape of the diffraction lines, but also by a decrease in amorphous inclusions, indicates the annealing of defects and the formation of stable phases.





Figure 1 - SEM images of the studied nanocomposites: a) Pristine sample; b) 600°C; c) 800°C; d) 1000°C



Figure 2 – X-ray diffraction patterns of the studied nanocomposites depending on annealing temperature

Figure 3 shows the results of changes in the phase diagram of nanocomposites calculated on the basis of the obtained X-ray data. According

to this diagram, it can be seen that the main process of phase transformations can be written as follows:

$$Fe_2O_3 / Nd_2O_3 \xrightarrow{600^{\circ}C} Fe_2O_3 / Nd_2O_3 / NdFeO_3 \xrightarrow{1000^{\circ}C} NdFeO_3(Fe_2O_3)$$



Figure 3 – Dynamics of phase transformations as a result of thermal annealing

Structural parameters such as crystal lattice parameters, crystallite size, dislocation density and degree of crystallinity were calculated on the basis of the obtained X-ray diffraction patterns. The results of these crystallographic characteristics are presented in Table 1.

Parameter	Phase	Pristine	600°C	800°C	1000°C
	Fe ₂ O ₃	a=5.04646, c=13.78934	a=5.02568, c=13.72175	a=5.00498, c=13.65987	a=4.99615, c=13.63564
Crystal lattice	Nd ₂ O ₃	a=11.03509	a=10.99398	-	-
parameter, Å	NdFeO ₃	-	a=5.59723, b=7.74027, c=5.43482	a=5.57638, b=7.70840, c=5.41883	a=5.57638, b=7.68573, c=5.40927
Crystallite	e size, nm	10.6±1.1	12.9±1.4	25.4±2.2	44.9±3.1
Dislocation de	nsity, 10 ¹⁰ cm ⁻²	8.89	6.01	1.55	0.49
Crystallinit	y degree, %	74.3	76.1	84.7	87.9

 Table 1 – Crystallographic data

From the data presented in Table 1, it can be seen that thermal annealing leads not only to the processes of phase transformations, but also to the ordering of the structure due to a decrease in dislocation density, an increase in the size of crystallites, as well as an increase in the crystallinity degree, which indicates a decrease in amorphous and disordered inclusions in the structure of annealed composites.

Conclusion

The paper presents the results of the study of the dynamics of phase transformations and changes in the morphological and structural features of the synthesized Fe_2O_3 -Nd_2O_3 \rightarrow NdFeO_3/Fe_2O_3 nanocomposites as a result of thermal annealing. Scanning electron microscopy and X-ray phase analysis were used as methods for characterization. During experiments carried out, it was found that the formation of the NdFeO_3 phase begins at a temperature of 600°C, followed by ordering and dominance at higher temperatures. It has been determined that the formation

of the NdFeO₃ phase leads to an increase in the degree of structural ordering, a decrease in amorphous inclusions, and an increase in the grain size. Analysis of the morphological features showed that an increase in the annealing temperature leads not only to an increase in the grain size with the formation of large agglomerates of a dendritic structure, but also to a significant ordering of the grains, which indicates an increase in their density.

The obtained data on the dynamics of phase transformations can be used further as a basis for the development of a technology for the production of magnetic nanocomposites on an industrial scale.

Funding

This study was funded by the Ministry of Education and Science of the Republic of Kazakhstan (grant AP09259184).

Conflicts of Interest

The authors declare no conflict of interest.

References

1 Pati S. S. et al. High temperature phase transformation studies in magnetite nanoparticles doped with Co2+ ion //Journal of Applied Physics. -2012. -Vol. 112. -N 5. -P. 054320-054330.

2 Ding Y. et al. Phase transformation and magnetic moment in FePt nanoparticles //Journal of applied physics. – 2003. – Vol. 93. – №. 10. – P. 7411-7413.

3 Wittig J. E., Bentley J., Allard L. F. In situ investigation of ordering phase transformations in FePt magnetic nanoparticles // Ultramicroscopy. - 2017. - Vol. 176. - P. 218-232.

4 Hai H. T. et al. Facile synthesis of Fe3O4 nanoparticles by reduction phase transformation from γ -Fe2O3 nanoparticles in organic solvent //Journal of colloid and interface science. – 2010. – Vol. 341. – No. 1. – P. 194-199.

5 Tadic M. et al. Surface-induced reversal of a phase transformation for the synthesis of ϵ -Fe2O3 nanoparticles with high coercivity //Acta Materialia. – 2020. – Vol. 188. – P. 16-22.

6 Anupama A. V., Keune W., Sahoo B. Thermally induced phase transformation in multi-phase iron oxide nanoparticles on vacuum annealing //Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2017. – Vol. 439. – P. 156-166.

7 Ayyappan S. et al. Effect of initial particle size on phase transformation temperature of surfactant capped Fe3O4 nanoparticles //Journal of Applied Physics. – 2011. – Vol. 109. – №. 8. – P. 084303-084310.

8 Khan U. S. et al. Transformation mechanism of magnetite nanoparticles //Materials Science-Poland. – 2015. – Vol. 33. – №. 2. – P. 278-285.

9 Wang S. F. et al. Phase controlled synthesis of (Mg, Ca, Ba)-ferrite magnetic nanoparticles with high uniformity //Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2016. – Vol. 419. – P. 464-475.

10 Naghdi S., Rhee K. Y., Park S. J. Shape-Dependent Magnetic Properties and Phase Transformation of Annealed Iron Oxide Nanoparticles //JOM. – 2017. – Vol. 69. – №. 8. – P. 1415-1421.

11 Wu Z. et al. Effect of Pd doping on the acetone-sensing properties of NdFeO 3 //International Journal of Minerals, Metallurgy, and Materials. – 2012. – Vol. 19. – №. 2. – P. 141-145.

12 Halilu A. et al. Highly selective hydrogenation of biomass-derived furfural into furfuryl alcohol using a novel magnetic nanoparticles catalyst //Energy & Fuels. – 2016. – Vol. 30. – №. 3. – P. 2216-2226.

13 Abdolmohammad-Zadeh H., Salimi A. Preconcentration of Pb (II) by using Mg (II)-doped NiFe2O4 nanoparticles as a magnetic solid phase extraction agent //Microchimica Acta. – 2018. – Vol. 185. – №. 7. – P. 1-8.

14 Halilu A. et al. Synthesis of fuel grade molecules from hydroprocessing of biomass-derived compounds catalyzed by magnetic Fe (NiFe) O4-SiO2 nanoparticles //Symmetry. -2019. - Vol. 11. - No. 4. - P. 524.

15 Farhadi S., Momeni Z., Taherimehr M. Rapid synthesis of perovskite-type LaFeO3 nanoparticles by microwave-assisted decomposition of bimetallic La [Fe (CN) 6] \cdot 5H2O compound //Journal of alloys and compounds. – 2009. – Vol. 471. – No. 1-2. – P. L5-L8.

16 Somvanshi A., Husain S., Khan W. Investigation of structure and physical properties of cobalt doped nano-crystalline neodymium orthoferrite //Journal of Alloys and Compounds. - 2019. - Vol. 778. - P. 439-451.

17 Shanker J., Suresh M. B., Babu D. S. Synthesis, characterization and electrical properties of NdXO3 (X= Cr, Fe) nanoparticles //Materials Today: Proceedings. – 2016. – Vol. 3. – №. 6. – P. 2091-2100.

18 Vavra M. et al. Exchange Bias Effect in NdFeO3 System of Nanoparticles //Acta Physica Polonica. Series A: General Physics, Physics of Condensed Matter, Optics and Quantum Electronics, Atomic and Molecular Physics, Applied Physics. – 2017. – VolT. 131. – No. 4. – P. 869-871.

19 Khorasani-Motlagh M. et al. Chemical synthesis and characterization of perovskite NdFeO3 nanocrystals via a co-precipitation method //International Journal of Nanoscience and Nanotechnology. – 2013. – Vol. 9. – №. 1. – P. 7-14.

20 Nguyen T. A. et al. Co-Doped NdFeO3 Nanoparticles: Synthesis, Optical, and Magnetic Properties Study //Nanomaterials. – 2021. – Vol. 11. – №. 4. – P. 937-945.

21 Nguyen T. A. et al. Simple Synthesis of NdFeO3 Nanoparticles By the Co-Precipitation Method Based on a Study of Thermal Behaviors of Fe (III) and Nd (III) Hydroxides //Crystals. -2020. - Vol. 10. - No. 3. - P. 219-225.

22 Dai Luu M. et al. A new perovskite-type NdFeO3 adsorbent: synthesis, characterization, and As (V) adsorption //Advances in Natural Sciences: Nanoscience and Nanotechnology. -2016. - Vol. 7. - No. 2. - P. 025015.

23 Anajafi Z. et al. NdFeO 3 as a new electrocatalytic material for the electrochemical monitoring of dopamine //Analytical and bioanalytical chemistry. -2019. - Vol. 411. - No. 29. - P. 7681-7688.

24 Chanda S. et al. Raman spectroscopy and dielectric properties of nanoceramic NdFeO3 //Materials Research Bulletin. – 2013. – Vol. 48. – №. 4. – P. 1688-1693.

25 Eshraghi M. Effects of Fe Ion Vacancy on Magnetic Properties of NiFe 2 O 4 Ferrite Nanoparticles //Journal of Superconductivity and Novel Magnetism. – 2018. – Vol. 31. – №. 8. – P. 2443-2448.

26 Kadyrzhanov K. K. et al. Synthesis and properties of ferrite-based nanoparticles //Nanomaterials. – 2019. – Vol. 9. – № 8. – Р. 1079.

27 Kozlovskiy A. et al. Fe2O3 Nanoparticles Doped with Gd: Phase Transformations as a Result of Thermal Annealing // Molecules. – 2021. – Vol. 26. – №. 2. – P. 457.

References

1 S.S. Pati et al., Journal of Applied Physics, 112 (5), 054320-054330 (2012).

2 Y. Ding et al. Journal of applied physics, 93 (10), 7411-7413 (2003).

3 J.E. Wittig, J. Bentley, L.F. Allard, Ultramicroscopy, 176, 218-232 (2017).

4 H.T. Hai, et al., Journal of colloid and interface science, 341 (1), 194-199 (2010).

5 M. Tadic, et al., Acta Materialia, 188, 16-22 (2020).

6 A.V. Anupama, W. Keune, B. Sahoo, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 439, 156-166 (2017).

7 S. Ayyappan et al., Journal of Applied Physics, 109 (8), 084303-084310 (2011).

8 U.S. Khan et al., Materials Science-Poland, 33 (2), 278-285 (2015).

9 S.F. Wang et al., Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 419, 464-475 (2016).

10 S. Naghdi, K.Y. Rhee, S.J. Park, JOM, 69 (8), 1415-1421 (2017).

11 Z. Wu et al., International Journal of Minerals, Metallurgy, and Materials, 19 (2), 141-145 (2012).

12 A. Halilu et al., Energy & Fuels, 30 (3), 2216-2226 (2016).

13 H. Abdolmohammad-Zadeh, A. Salimi, Microchimica Acta, 185 (7), 1-8 (2018).

14 A. Halilu et al., Symmetry, 11 (4), 524 (2019).

15 S. Farhadi, Z. Momeni, M. Taherimehr, Journal of alloys and compounds, 471 (1-2), L5-L8 (2009).

16 A. Somvanshi, S. Husain, W. Khan, Journal of Alloys and Compounds, 778, 439-451 (2019).

17 J. Shanker, M.B. Suresh, D.S. Babu, Materials Today: Proceedings, 3 (6), 2091-2100 (2016).

18 M. Vavra et al., Acta Physica Polonica. Series A: General Physics, Physics of Condensed Matter, Optics and Quantum Electronics, Atomic and Molecular Physics, Applied Physics, 131 (4), 869-871 (2017).

19 M. Khorasani-Motlagh et al., International Journal of Nanoscience and Nanotechnology, 9 (1), 7-14 (2013).

20 T.A. Nguyen et al., Nanomaterials, 11 (4), 937-945 (2021).

21 T.A. Nguyen et al. Crystals, 10 (3), 219-225 (2020).

22 M. Dai Luu et al., Advances in Natural Sciences: Nanoscience and Nanotechnology, 7 (2), 025015 (2016).

23 Z. Anajafi et al., Analytical and bioanalytical chemistry, 411 (29), 7681-7688 (2019).

24 S. Chanda et al., Materials Research Bulletin, 48 (4), 1688-1693 (2013).

25 M. Eshraghi, Journal of Superconductivity and Novel Magnetism, 31 (8), 2443-2448 (2018).

26 K.K. Kadyrzhanov et al., Nanomaterials. - 2019. - Vol. 9. - №. 8. - P. 1079.

27 A. Kozlovskiy et al., Molecules, 26 (2), 457 (2021).

МРНТИ 29.29.39, 29.29.49



¹Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Казахстан, г. Нур-Султан ²ТОО «Центр исследования люминесцентных материалов», Казахстан, г. Нур-Султан *e-mail: asylaliya@yandex.kz

РАССМОТРЕНИЕ ВЛИЯНИЯ САМОАГРЕГИРОВАНИЯ В НАНОРАЗМЕРНЫХ КЛАСТЕРАХ CDS

Квантовые точки, такие как сульфида кадмия (CdS), являются полупроводниковыми нанокристаллами, которые обладают уникальными оптическими свойствами, включая возбуждение в широком диапазоне, перестраиваемые по размеру узкие спектры излучения и высокую фотостабильность. Размер и состав квантовых точек можно варьировать, чтобы получить желаемые свойства излучения и сделать их пригодными в различных оптических и биомедицинских приложениях. В данной статье методами компьютерного моделирования на основе теории функционала плотности с сильной связью (DFTB) рассмотрено влияние самоагрегирования на электронные спектры поглощения и на дипольный момент в наночастицах CdS. Объектом исследования являются четыре структуры CdS и две модели агрегированного димера для каждого кластера. Построение димеров кластеров сульфида кадмия показало, что можно добиться более высокого уровня пассивирования в сравнении с исходными мономерами. При этом построение димеров должно происходить вдоль направления дипольного момент играет ключевую роль в формировании локализованных состояний в наноразмерных кластерах сульфида кадмия и задача пассивирования сводится к минимизации дипольного момента.

Ключевые слова: кластеры CdS, метод DFTB, самоагрегирования, пассивирования, дипольный момент.

A.M. Assilbekova^{1*}, A.A. Aldongarov¹, I.S. Irgibaeva^{1,2} ¹L.N. Gumilyov Eurasian National University, Kazakhstan, Nur-Sultan ²LLP «Center for research of luminescent materials», Kazakhstan, Nur-Sultan *e-mail: asylaliya@yandex.kz

Consideration of the effect of self-aggregation in nanoscale CdS clusters

Quantum dots, such as cadmium sulfide (CdS), are semiconductor nanocrystals that possess unique optical properties, including wide-range excitation, size-tunable narrow emission spectra and high photostability. The size and composition of quantum dots can be varied to obtain the desired emission properties and make them suitable for various optical and biomedical applications. In this article, the effect of self-aggregation on the electronic absorption spectra and on the dipole moment in CdS nanoparticles is considered using computer modeling methods based on the density functional tight-binding (DFTB). The object of the study is four CdS structures and two models of an aggregated dimer for each cluster. The construction of dimers of cadmium sulfide clusters showed that a higher level of passivation can be achieved in comparison with the initial monomers. In this case, the construction of dimers should occur along the direction of the dipole moment of the monomer in order to minimize it. Therefore, it can be assumed that the dipole moment plays a key role in the formation of trap states in nanosized clusters of cadmium sulfide, and the problem of passivation is reduced to minimizing the dipole moment.

Key words: CdS clusters, DFTB method, self-aggregation, passivation, dipole moment.

А.М. Асильбекова^{1*}, А.А. Алдонгаров¹, И.С. Иргибаева^{1,2}

¹Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Қазақстан, Нұр-Сұлтан қ. ²«Люминесцентті материалдарды зерттеу орталығы» ЖШС, Қазақстан, Нұр-Сұлтан қ.

*e-mail: asylaliya@yandex.kz

CdS наноөлшемді кластерлерінде өзіндік агрегациялаудың әсерін қарастыру

Кадмий сульфиді (CdS) сияқты кванттық нүктелер – бұл ерекше оптикалық қасиеттерге ие, оның ішінде кең диапазондағы қозу, өлшемі реттелетін тар эмиссиялық спектрлер және жоғары фотостабильділік секілді қасиеттері бар жартылай өткізгіш нано кристалдар. Сәулеленудің қажетті қасиеттерін алу үшін және оларды әртүрлі оптикалық және биомедициналық

қосымшаларда қолдануға жарамды ету үшін кванттық нүктелердің мөлшері мен құрамын өзгертуге болады. Бұл мақалада күшті байланысы бар тығыздық функционалы (DFTB) теориясына негізделген компьютерлік модельдеу әдістерін қолдана отырып, өзіндік агрегациялаудың CdS нанобөлшектеріндегі электрондық жұту спектріне және диполь моментіне әсері қарастырылды. Зерттеу нысаны төрт CdS құрылымы және әр кластер үшін біріктірілген димердің екі моделі болып табылады. Кадмий сульфидінің кластерлік димерлерінің құрылысы бастапқы мономерлермен салыстырғанда пассивациялаудың жоғары деңгейіне қол жеткізуге болатындығын көрсетті. Бұл жағдайда димерлердің құрылысы мономердің диполь моментінің мәнін азайту үшін оның бағыты бойынша жүруі керек. Сондықтан диполь моменті кадмий сульфидінің нано өлшемді кластерлерінде локализацияланған күйлердің қалыптасуында шешуші рөл атқарады деп болжауға болады және пассивация міндеті диполь моментін төмендетуге бағытталады.

Түйін сөздер: CdS кластерлері, DFTB әдісі, өзіндік агрегациялау, пассивация, диполь моменті.

Введение

В последние два десятилетия полупроводниковые наноразмерные кристаллы стали одними из широко исследуемых объектов с большим потенциалом применений в современных технологиях за счет своих оптических свойств. Среди многих коллоидных полупроводников нанокристаллов CdS привлек значительный интерес из-за широкого спектра применений, таких как фотоэлектрические сенсоры [1-4], светодиоды [5-8], лазеры [9-11], биомаркеры [11-15]. Примечательно, что CdS является одним из наиболее эффективных фотопроводящих сенсибилизаторов из-за соответствующей оптической запрещенной зоны 2,42–2,45 эВ. Кроме того, сульфид кадмия наиболее существенно изученный нанокристаллический полупроводник не только из-за его подходящей энергии запрещенной зоны, но и из-за уникальных оптических свойств, замечательной стабильности и простого процесса получения. Однако в реальных нанокристаллах могут возникать некоторые локализованные состояния в области запрещенной зоны, приводящей к захвату носителей заряда, которые понижают квантовый выход свечения полупроводникового нанокристалла. Считается, что причина формирования локализованных состояний - поверхностные дефекты [16,17], такие как оборванные связи поверхностных атомов или примесные атомы.

Однако наши предыдущие результаты [18,19] с применением приближения DFT для небольших кластеров CdS показали, что дипольный момент наноразмерных кристаллов скорее играет важную роль в образовании локализованных состояний, чем сами поверхностные дефекты. В данной работе мы рассмотрели влияние дипольного момента на формирование локализованных состоянии в относительно больших квантовых точках CdS с помощью метода DFTB. Как один из методов изменения дипольного момента мы выбрали метод самоагрегирования. Для этого мы рассмотрели четыре структуры CdS $[Cd_4S_1SH_6]^0$, $[Cd_4S_1(SH)_{12}]^{6-}$, $[Cd_{22}S_{10}(SH)_{21}]^{3+}$, $[Cd_{28}S_{13}(SH)_{36}]^{6-}$ и две модели агрегированного димера для каждого кластера, которые были построены по направлению дипольного момента основных структур.

Методика расчетов

Для расчетов использовался метод функционала плотности с сильной связью (DFTB) [20-23], который особенно хорошо подходит для расчета электронных структур больших систем (до несколько тысяч атомов) или для симулирования динамики на большом временном промежутке. DFTB расчет производился в программном пакете demon, на высокопроизводительном вычислительном ресурсе в Техническом университете Дрездена.

Для каждого кластера рассчитывалось малликеновское распределение зарядов, на основе которого проводился расчет дипольного момента [24]. Заряд кластеров во всех расчетах определялся по следующей формуле $q = 2 \times (g-j) - k$ для кластера с общей формулой [Cd $_{g}S_{j}(SH)_{k}$]^q [25]. Во всех рассмотренных структурах использовалась вюрцитовая кристаллическая решетка CdS, построенная по экспериментальным данным.

Результаты и обсуждения

Для рассмотрения влияния самоаггрегирования на электронные переходы в наноразмерных кластерах CdS был проведены расчеты оптимизированной структуры и электронного спектра поглощения кластера [Cd₄S₁SH₆] (рисунок 1).



а) — структура [Cd₄S₁SH₆]; б) — структура [Cd₈S₃SH₁₂]²; в) — структура [Cd₈S₂SH₁₂]

Рисунок 1 – Оптимизированные структуры и их дипольные моменты

После определения направления и величины дипольного момента строилась модель агрегированного димера кластера по направлению дипольного момента с целью минимизации дипольного момента димера. Таким образом, были получены два варианта димера [Cd₈S₃SH₁₂]²⁻ и [Cd₈S₂SH₁₂], структуры которых оптимизировались (рисунок 1). В первом вари-

анте дополнительный атом серы использовался как мостик для образования связи вдоль направления вектора дипольного момента. Для обоих вариантов димеров рассчитывались энергии первых электронных переходов и дипольные моменты. Данные расчетов электронных спектров и дипольных моментов представлены в таблице 1.

Таблица 1 – Рассчитанные для кластеров $[Cd_4S_1SH_6]$, $[Cd_8S_3SH_{12}]^2$ - и $[Cd_8S_2SH_{12}]$ энергии первых переходов E_1 и их сила осциллятора f, а так же дипольные моменты μ

Кластер	Е ₁ (эВ)	f	μ (Кл м)
[Cd ₄ S ₁ SH ₆]	2,827	0,0049724	8,12×10 ⁻²⁹
[Cd ₈ S ₃ SH ₁₂] ²⁻	4,609	0,0303504	0,85×10 ⁻²⁹
[Cd ₈ S ₂ SH ₁₂]	2,699	0,0018141	0,20×10 ⁻²⁹

Как видно из таблицы 1, агрегирование приводило к понижению дипольного момента. При формировании димера $[Cd_8S_3(SH)_{12}]^{2-}$ через дополнительный атом серы помимо понижения дипольного момента происходило повышение энергии первого перехода с увеличением его силы осциллятора. Это указывает на то, что данный вариант димера лучше пассивирован, чем исходный кластер $[Cd_4S_1(SH)_6]$. С другой стороны, формирование агрегированного димера $[Cd_8S_2(SH)_{12}]$ сопровождалось небольшим понижением энергии первого перехода в сравнении с исходным мономером $[Cd_4S_1(SH)_6]$, что указывает на большую вероятность формирования локализованных состояний в данном димере. Однако, учитывая квантоворазмерый эффект можно предположить, что при вдвое большем размере димера $[Cd_8S_2(SH)_{12}]$ в сравнении с исходным кластером $[Cd_4S_1(SH)_6]$ их разница в энергии E_1 может считаться незначительной. Таким образом, образование димера в направлении понижения дипольного момента может приводить к значительному понижению формирования локализованных состояний.

Для сравнения качества пассивирования димеров и исходного кластера для всех структур нами была рассчитана величина $E_1 \times n_f$, где n_f количество интенсивных переходов (большая сила осциллятора) среди первых 10 электронных переходов. Локализованные состояния характеризуются малой вероятностью перехода в электронных переходах и малой энергией. Поэтому чем больше величина $E_1 \times n_f$, тем лучше пассивирование и меньше вероятность формирования локализованных состояний. И наоборот, чем меньше $E_1 \times n_f$ тем больше вероятность образования глубоко лежащих локализованных состояний. На рисунке 2 представлен график зависимости $E_1 \times n_f$ от дипольного момента для $[Cd_4S_1(SH)_6]^0$ и его агрегированных структур $[Cd_8S_3(SH)_{12}]^{2-}$, $[Cd_8S_2(SH)_{12}]^0$.



Рисунок 2 – Зависимость $E_1 \times n_f$ от дипольного момента в кластере $[Cd_4S_1(SH)_6]^0$ и его агрегированных структур $[Cd_8S_3(SH)_{12}]^2$, $[Cd_8S_2(SH)_{12}]^0$

Как видно рисунка 2 кластер ИЗ $[Cd_{8}S_{3}(SH)_{12}]^{2-}$ демонстрирует наилучшую степень пассивирования при малом значении дипольного момента. Кластеры [Cd₄S₁(SH)₄]⁰ и $[Cd_8S_2(SH)_{12}]^0$ демонстрируют примерно одинаковое значение E₁ × n_f. Однако, учитывая квантоворазмерный эффект и вдвое больший размер димера $[Cd_8S_2(SH)_{12}]^0$, можно утверждать, что этот димер проявляет более высокую степень пассивирования при значительно меньшем дипольном моменте в сравнении с исходным мономером $[Cd_{A}S_{1}(SH)_{6}]^{0}$. Таким образом, можно сделать вывод, что понижение дипольного момента за счет формирования димера можно использовать как метод пассивирования наноразмерных кластеров сульфида кадмия.

Далее для рассмотрения влияния самоагрегирования на электронные переходы в наноразмерных кластерах CdS был проведены расчеты оптимизированной структуры и электронного спектра поглощения кластера [Cd₄S₁(SH)₁,]⁶.

Определив направление и величину дипольного момента оптимизированной структуры (рисунок 3) строилась модель агрегированного димера кластера по направлению дипольного момента с целью минимизации дипольного момента. Таким образом, был получен один вариант димера [Cd₈S₂(SH)₂₄]¹²⁻. В этом варианте димера два одинаковых кластера [Cd₄S₁(SH)₁₂]⁶⁻ были расположены так, что вектора дипольных моментов были направлены друг на друга. Данные расчетов электронных спектров и дипольных моментов представлены в таблице 2.



а) – структура $[Cd_4S_1(SH)_{12}]^{6-}$; б) – структура $[Cd_8S_2(SH)_{24}]^{12-}$ Рисунок 3 – Оптимизированные структуры $[Cd_4S_1(SH)_{12}]^{6-}$ и $[Cd_8S_2(SH)_{24}]^{12-}$ и их дипольные моменты

Таблица 2 – Рассчитанные для кластеров $[Cd_4S_1(SH)_{12}]^{6-}$ и $[Cd_8S_2(SH)_{24}]^{12-}$ энергии первых переходов E_1 и их сила осциллятора f, а так же дипольные моменты μ

Кластер	Е ₁ (эВ)	f	μ (Кл м)
[Cd ₄ S ₁ (SH) ₁₂] ⁶⁻	0,153	0,0000179	2,645997×10 ⁻²⁹
[Cd ₈ S ₂ (SH) ₂₄] ¹²⁻	5,164	0,0963374	0,970712×10 ⁻²⁹

Как видно из таблицы 2, агрегирование приводило к понижению дипольного момента. При формировании димера $[Cd_{8}S_{2}(SH)_{24}]^{12}$ через противоположное направление дипольных моментов мономеров помимо понижения общего дипольного момента происходило значительное повышение энергии первого перехода. Это указывает на то, что данный вариант димера значительно лучше пассивирован, чем исходный кластер $[Cd_{4}S_{1}(SH)_{12}]^{6}$. К тому же, учитывая квантоворазмерый эффект можно предположить, что при вдвое большем размере димера [Cd₈S₂(SH)₂₄]¹²⁻ в сравнении с исходным кластером $[Cd_{4}S_{1}(SH)_{12}]^{6-1}$ значительно лучшая пассивация достигается, чем это указывает только разница величин Е₁, хотя и эта разница велика. Также видно, что в случае димера величина f также значительно больше, чем в случае исходного мономера с большим дипольным моментом. Таким образом, образование димера с понижением дипольного момента может приводить к значительному понижению вероятности формирования локализованных состояний.

Для кластера $[Cd_{22}S_{10}(SH)_{21}]^{3+}$ была рассчитана оптимизированная геометрия (рисунок

18), определена величина дипольного момента и энергии первых 10 электронных переходов. Вдоль направления вектора дипольного момента было произведено построение второго аналогичного комплекса с целью понижения дипольного момента в аггрегированном димере кластера $[Cd_{22}S_{10}(SH)_{21}]^{3+}$. В результате был получен димер $[Cd_{44}S_{20}(SH)_{42}]^{6+}$. Также был получен другой димер $[Cd_{45}S_{20}(SH)_{42}]^{8+}$ образованный через добавление связывающего атома кадмия вдоль линии соединения 2-х кластеров $[Cd_{22}S_{10}(SH)_{21}]^{3+}$ (по направлению дипольного момента). Для двух вариантов димера были рассчитаны оптимизированные структуры (рисунок 4), дипольные моменты и энергии электронных переходов. Полученные данные для энергий первых электронных переходов Е, их силы осциллятора f и дипольных моментов представлены в таблице 12.

Результаты представленные в таблице 12 показывают, что в случае димера $[Cd_{44}S_{20}(SH)_{42}]^{6+}$ величина E_1 немного понижается в сравнении с исходным мономером $[Cd_{22}S_{10}(SH)_{21}]^{3+}$, но при этом увеличивается f. Принимая во внимание квантоворазмерный эффект, можно утверждать, что димер $[Cd_{44}S_{20}(SH)_{42}]^{6+}$ лучше пассивирован, чем мономер $[Cd_{22}S_{10}(SH)_{21}]^{3+}$. Для кластера димера $[Cd_{45}S_{20}(SH)_{42}]^{8+}E_1$ и f значительно пони-

жаются в сравнении с исходным мономером $[Cd_{22}S_{10}(SH)_{21}]^{3+}$, что указывает на плохую пассивацию.



а) – структура $[{\rm Cd}_{22}{\rm S}_{10}({\rm SH})_{21}]^{3+};$ б) – структура $[{\rm Cd}_{45}{\rm S}_{20}({\rm SH})_{42}]^{8+};$ в) – структура $[{\rm Cd}_{44}{\rm S}_{20}({\rm SH})_{42}]^{6+}$ **Рисунок 4** – Оптимизированные структуры и их дипольные моменты

Таблица 3 – Рассчитанные для кластеров $[Cd_{22}S_{10}(SH)_{21}]^{3+}$ и $[Cd_{45}S_{20}(SH)_{42}]^{8+}$, $[Cd_{44}S_{20}(SH)_{42}]^{6+}$ энергии первых переходов E_1 и их сила осциллятора f, а так же дипольные моменты μ

Кластер	Е ₁ (эВ)	f	μ (Кл м)
$[Cd_{22}S_{10}(SH)_{21}]^{3+}$	3,803	0,0833809	5,21×10 ⁻²⁹
$[Cd_{45}S_{20}(SH)_{42}]^{8+}$	2,284	0,0259480	3,44×10 ⁻²⁹
[Cd ₄₄ S ₂₀ (SH) ₄₂] ⁶⁺	3,670	0,1014945	1,89×10 ⁻²⁹

Для более детальной оценки качества пассивирования был построен график зависимости величины $E_1 \times n_f$ от дипольного момента для мономера и двух димеров, который представлен на рисунке 5. Данные представленный на рисунке 5 показывают, что предположение о гораздо более высоком уровне пассивирования при значительном уменьшении дипольного момента в случае димера [Cd₄₄S₂₀(SH)₄₂]⁶⁺ верно. Также подтверждается низкий уровень пассивирования для димера $[Cd_{45}S_{20}(SH)_{42}]^{8+}$ при незначительном понижении дипольного момента. Таким образом на примере кластера $[Cd_{22}S_{10}(SH)_{21}]^{3+}$ и его агрегированных структур $[Cd_{45}S_{20}(SH)_{42}]^{8+}$ и

[Cd₄₄S₂₀(SH)₄₂]⁶⁺ показано, что агрегирование по направлению дипольного момента с целью его понижения может значительно улучшать качество пассивирования наноразмерных кластеров сульфида кадмия.



Рисунок 5 – Зависимость $E_1 \times n_f$ от дипольного момента в кластере $[Cd_{22}S_{10}(SH)_{21}]^{3+}$ и его агрегированных структур $[Cd_{45}S_{20}(SH)_{42}]^{8+}$, $[Cd_{44}S_{20}(SH)_{42}]^{6+}$

был Далее рассмотрен кластер [Cd₂₈S₁₃(SH)₃₆]⁶⁻. Для кластера [Cd₂₈S₁₃(SH)₃₆]⁶⁻ была рассчитана оптимизированная геометрия (рисунок 6), определена величина дипольного момента и энергии первых 10 электронных переходов. Вдоль направления вектора дипольного момента было произведено построение второго аналогичного комплекса с добавлением связывающего атома серы с целью понижения дипольного момента в аггрегированном димере кластера [Cd₂₈S₁₃(SH)₃₆]⁶⁻. В результате был получен димер $[Cd_{56}S_{27}(SH)_{72}]^{14}$. Также были построены еще два других димера [Cd₅₆S₂₆(SH)₇₂]¹²⁻ с расстоянием между мономерами 32 Å и 11,1 Å. Построение этих двух димеров происходило вдоль направления дипольного момента с целью его понижения. Для трех вариантов димера были рассчитаны оптимизированные структуры (рисунок 6), дипольные моменты и энергии электронных переходов. Полученные данные для энергий первых электронных переходов E₁ их силы осциллятора f и дипольных моментов представлены в таблице 4.

В соответствии с данными таблицы 4 для всех трех димеров было получено меньшее значение дипольного момента при понижении энергии первого перехода вместе с уменьшением значения f. На первый взгляд это может указывать на ухудшение качества пассивирования кластеров в случае димеров по сравнению с исходным мономером. Однако, с одной стороны надо принимать во внимание квантово-размерный эффект, и с другой стороны понижение энергии E₁ для димеров [Cd₅₆S₂₇(SH)₇₂]¹⁴ и [Cd₅₆S₂₆(SH)₇₂]¹²⁻ (32 Å) довольно незначительное в сравнении с исходным мономером.

Для более детальной оценки качества пассивирования был построен график зависимости величины $E_1 \times n_f$ от дипольного момента для мономера и трех димеров, который представлен на рисунке 7.



а) – структура [Cd₂₈S₁₃(SH)₃₆]⁶; б) – структура [Cd₅₆S₂₇(SH)₇₂]¹⁴; в) и г) – структура [Cd₅₆S₂₆(SH)₇₂]¹² (расстояние между мономерами 32 Å и 11,1 Å)

Рисунок 6 – 0	Оптимизи	рованные	структуры	и их ди	польные	моменты

Таблица 4 – Рассчитанные для кластеров $[Cd_{28}S_{13}(SH)_{36}]^6$, $[Cd_{56}S_{27}(SH)_{72}]^{14}$, $[Cd_{56}S_{26}(SH)_{72}]^{12}$ (расстояние между мономерами 32 Å и 11,1 Å) энергии первых переходов E_1 и их сила осциллятора f, а так же дипольные моменты μ

Кластер	Е ₁ (эВ)	f	μ (Кл м)
[Cd ₂₈ S ₁₃ (SH) ₃₆] ⁶⁻	3,818	0,1100189	47,07×10 ⁻²⁹
[Cd ₅₆ S ₂₇ (SH) ₇₂] ¹⁴⁻	3,754	0,0725840	9,80×10 ⁻²⁹
$[Cd_{56}S_{26}(SH)_{72}]^{12-} 32 \text{ Å}$	3,755	0,0000000	2,68×10 ⁻²⁹
[Cd ₅₆ S ₂₆ (SH) ₇₂] ¹²⁻ 11,1 Å	2,189	0,0000043	2,61×10 ⁻²⁹

Данные, представленные на рисунке 7 указывают на то, что димер $[Cd_{56}S_{26}(SH)_{72}]^{12}$ (32 Å) показывает налучшее качество пассивирования, даже несмотря на нулевую силу осциллятора первого перехода. Это связано с тем, что для этого димера имеется 4 интенсивных перехода в первых 10 электронных переходах. Для всех остальных кластеров их меньше. При этом следует учитывать, что данные по сравнению величин $E_1 \times n_f$ представленные на рисунке 7 не включают учет квантоворазмерного эффекта.



Рисунок 7 – Зависимость $E_1 \times n_f$ от дипольного момента в кластерах [Cd₂₈S₁₃(SH)₃₆]⁶⁻, [Cd₅₆S₂₇(SH)₇₂]¹⁴⁻, [Cd₅₆S₂₆(SH)₇₂]¹²⁻ (32 Å и 11,1 Å)

Заключение

Таким образом, можно предположить, что аггрегирование наноразмерных кластеров с целью понижения дипольных моментов может приводить к понижению вероятности формирования локализованных состояний в запрещенной зоне. Поэтому можно считать, что формирование локализованных состояний в полупроводниковых кластерах связано с наличием значительного дипольного момента, который способствует локализации носителей зарядов в определенных частях объема кластеров.

Литература

1 Ibrahim I., Lim H.N., Mohd Zawawi R., Ahmad Tajudin A., Ng Y.H., Guo H., Huang N.M. A review on visible-light induced photoelectrochemical sensors based on CdS nanoparticles // J. Mater. Chem. B. – 2018. – Vol. 6, Is. 28. – P. 4551–4568.

2 Song J.H., Jeong S. Colloidal quantum dot based solar cells: from materials to devices // Nano Converg. – 2017. – Vol.4, Is. 1. 3 Kirmani A.R., Luther J.M., Abolhasani M., Amassian A. Colloidal Quantum Dot Photovoltaics: Current Progress and Path to GW-Scale Enabled by Smart Manufacturing // ACS Energy Lett. – 2020. – Vol. 5, Is. 9. – P. 3069–3100.

4 Kershaw S.V., Jing L., Huang X., Gao M., Rogach A.L. Materials aspects of semiconductor nanocrystals for optoelectronic applications // Mater. Horiz. - 2017. - Vol.4, Is. 2. - P. 155-205.

5 Jia H.R., Wang F.Z., Tan Z.A. Material and device engineering for high-performance blue quantum dot light-emitting diodes // Nanoscale. – 2020. – Vol. 12, Is. 25. – P. 13186–13224.

6 Kagan C.R., Lifshitz E., Sargent E.H., Talapin D.V. Building devices from colloidal quantum dots // Science. – 2016. – Vol. 353, Is. 6302. – P. aac5523–aac5523.

7 Krishnan C., Brossard M., Lee K.-Y., Huang J.-K., Lin C.-H., Kuo H.-C., Charlton M.D.B., Lagoudakis P.G. Hybrid photonic crystal light-emitting diode renders 123% color conversion effective quantum yield // Optica. – 2016. – Vol. 3, Is. 5. – P. 503–509.

8 Bozyigit D., Yarema O., Wood V. Origins of Low Quantum Efficiencies in Quantum Dot LEDs // Adv. Funct. Mater. – 2013. – Vol. 23, Is. 24. – P. 3024–3029.

9 Le Feber B., Prins F., De Leo E., Rabouw F.T., Norris D.J. Colloidal-Quantum-Dot Ring Lasers with Active Color Control // Nano Lett. - 2018. - Vol. 18, Is. 2. - P.1028-1034.

10 Rong K., Sun C., Shi K., Gong Q., Chen J. Room-Temperature Planar Lasers Based on Water-Dripping Microplates of Colloidal Quantum Dots // ACS Photonics. – 2017. – Vol. 4, Is. 7. – P. 1776–1784.

11 Zhang S., Zhukovskyi M., Jankó B., Kuno M. Progress in laser cooling semiconductor nanocrystals and nanostructures // NPG Asia Materials. - 2019. - Vol. 11, Is. 1. - 54.

12 Martynenko I.V., Litvin A.P., Purcell-Milton F., Baranov A.V., Fedorov A.V., Gun'ko Y.K. Application of semiconductor quantum dots in bioimaging and biosensing // J. Mater. Chem. B. – 2017. – Vol. 5, Is. 33. – P. 6701–6727.

13 Du D., Shu J., Guo M., Haghighatbin M.A., Yang D., Bian Z., Cu, H. Potential-Resolved Differential Electrochemiluminescence Immunosensor for Cardiac Troponin I Based on MOF-5 Wrapped CdS Quantum Dots Nanoluminophores // Anal. Chem. - 2020. - Vol. 92, Is. 20. - P. 14113-14121. 14 Shivaji K., Mani S., Ponmurugan P., De Castro C.S., Lloyd Davies M., Balasubramanian M.G., Pitchaimuthu S. Green-Synthesis-Derived CdS Quantum Dots Using Tea Leaf Extract: Antimicrobial, Bioimaging, and Therapeutic Applications in Lung Cancer Cells // ACS Appl. Nano Mater. – 2018. – Vol. 1, Is. 4. – P. 1683–1693.

15 Stavitskaya A.V., Novikov A.A., Kotelev M.S., Kopitsyn D.S., Rozhina E.V., Ishmukhametov I.R., ... Vinokurov V.A. Fluorescence and Cytotoxicity of Cadmium Sulfide Quantum Dots Stabilized on Clay Nanotubes // Nanomaterials. – 2018. – Vol. 8, Is. 6. – P. 391.

16 Giansante C., Infante I. Surface Traps in Colloidal Quantum Dots: A Combined Experimental and Theoretical Perspective // J. Phys. Chem. Lett. – 2017. – Vol. 8, Is. 20. – P. 5209–5215.

17 Kilina S., Ivanov S., Tretiak S. Effect of Surface Ligands on Optical and Electronic Spectra of Semiconductor Nanoclusters // J. Am. Chem. Soc. – 2009. – Vol. 131, Is. 22. – P. 7717–7726.

18 Aldongarov A.A., Assilbekova A.M., Irgibaeva I.S., Barashkov N.N. Modeling electronic excitations/formation of trap states in semiconducting nanocrystals // Chemical Modelling. – 2020. – Vol. 15. – P. 173–188.

19 Aldongarov A., Irgibaeva I., Hermansson H., Agren H. Theoretical study on passivation of small CdS clusters // Molecular Physics. – 2014. – Vol. 112, Is. 5-6. – P. 674–682.

20 Foulkes W.M.C., Haydock R. Tight-binding models and density-functional theory // Phys. Rev. B. - 1989. - Vol. 39, Is. 17. - P. 12520-12536.

21 Seifert G. Tight-Binding Density Functional Theory: An Approximate Kohn-Sham DFT Scheme // J. Phys. Chem. A. – 2007. – Vol. 111, Is. 26. – P. 5609–5613.

22 Koskinen P., Mäkinen V. Density-functional tight-binding for beginners // Comput. Mater. Sci. – 2009. – Vol. 47, Is. 1. – P. 237–253.

23 Seifert G., Joswig J.-O. Density-functional tight binding-an approximate density-functional theory method // WIREs Comput. Mol. Sci. – 2012. – Vol. 2, Is. 3. – P. 456–465.

24 Aldongarov A.A., Assilbekova A.M., Irgibaeva I.S., Mantel A.I. Comparison of calculated by DFTB electronic excitation energies of CdS nanosized clusters with DFT results // Eurasian J. Phys. Funct. Mater. – 2020. – Vol. 4, Is. 3. – P. 255–260.

25 Frenzel J., Joswig J.O., Seifert G. Optical Excitations in Cadmium Sulfide Nanoparticles // J. Phys. Chem. C. – 2007. – Vol. 111, Is. 29. – P. 10761-10770.

References

1 Ibrahim, I., Lim, H.N., Mohd Zawawi, R., Ahmad Tajudin, A., Ng Y.H., Guo H. and Huang N.M., J. Mater. Chem. B 6(28), 4551–4568 (2018).

2 Song, J.H., and Jeong, S., Nano Converg. 4(1) (2017).

3 Kirmani, A.R., Luther, J.M., Abolhasani, M., and Amassian, A., ACS Energy Lett. 5(9), 3069-3100 (2020).

4 Kershaw, S.V., Jing, L., Huang, X., Gao, M., and Rogach, A.L., Mater. Horiz., 4(2), 155–205 (2017).

5 Jia, H.R., Wang, F.Z., and Tan, Z.A., Nanoscale, 12(25), 13186–13224 (2020).

6 Kagan, C. R., Lifshitz, E., Sargent, E.H., and Talapin, D.V., Science, 353(6302), aac5523-aac5523 (2016).

7 Krishnan, C., Brossard, M., Lee, K.-Y., Huang, J.-K., Lin, C.-H., Kuo, H.-C., Charlton, M.D.B., and Lagoudakis, P.G., Optica, **3**(5), 503-509 (2016).

8 Bozyigit, D., Yarema, O., and Wood, V., Adv. Funct. Mater., 23(24), 3024-3029 (2013).

9 Le Feber, B., Prins, F., De Leo, E., Rabouw, F.T., and Norris, D.J., Nano Lett., 18(2), 1028-1034 (2018).

10 Rong, K., Sun, C., Shi, K., Gong, Q., and Chen, J., ACS Photonics, 4(7), 1776-1784 (2017).

11 Zhang, S., Zhukovskyi, M., Jankó, B., and Kuno, M., NPG Asia Materials, 11(1), 54 (2019).

12 Martynenko, I.V., Litvin, A.P., Purcell-Milton, F., Baranov, A.V., Fedorov, A.V., and Gun'ko, Y.K., J. Mater. Chem. B, 5(33), 6701–6727 (2017).

13 Du, D., Shu, J., Guo, M., Haghighatbin, M.A., Yang, D., Bian, Z., and Cui, H., Anal. Chem., 92(20), 14113–14121 (2020).

14 Shivaji, K., Mani, S., Ponmurugan, P., De Castro, C.S., Lloyd Davies, M., Balasubramanian, M.G., and Pitchaimuthu, S., ACS Appl. Nano Mater., 1(4), 1683–1693 (2018).

15 Stavitskaya, A.V., Novikov, A.A., Kotelev, M.S., Kopitsyn, D.S., Rozhina, E.V., Ishmukhametov, I.R., ... and Vinokurov, V.A., Nanomaterials, **8**(6), 391 (2018).

16 Giansante, C., and Infante, I., J. Phys. Chem. Lett., 8(20), 5209-5215 (2017).

17 Kilina, S., Ivanov, S., and Tretiak, S., J. Am. Chem. Soc., 131(22), 7717-7726 (2009).

18 Aldongarov, A.A., Assilbekova, A.M., Irgibaeva, I.S., and Barashkov, N.N., Chemical Modelling, 15, 173–188 (2020).

19 Aldongarov, A., Irgibaeva, I., Hermansson, H., and Agren, H., Mol. Phys., 112(5-6), 674-682 (2014).

20 Foulkes, W.M.C., and Haydock, R., Phys. Rev. B, 39(17), 12520-12536 (1989).

21 Seifert, G., J. Phys. Chem. A, 111(26), 5609-5613 (2007).

22 Koskinen, P., and Mäkinen, V., Comput. Mater. Sci., 47(1), 237-253 (2009).

23 Seifert, G., and Joswig, J.-O., WIREs Comput. Mol. Sci., 2(3), 456-465 (2012).

24 Aldongarov, A.A., Assilbekova, A.M., Irgibaeva, I.S., and Mantel, A.I., Eurasian J. Phys. Funct. Mater., 4(3), 255-260 (2020).

25 Frenzel, J., Joswig, J.O., and Seifert, G., J. Phys. Chem. C, 111(29), 10761-10770 (2007)

МРНТИ 41.19.25

https://doi.org/10.26577/RCPh.2021.v78.i3.07



Северо-Казахстанский университет им. М. Козыбаева, Казахстан, г. Петропавловск *e-mail: buseinov@gmail.com

ВЛИЯНИЕ ИНДУКТИВНОСТИ НА ПАРАМЕТРЫ ПЛАЗМЕННОГО ФОКУСА В ИМПУЛЬСНОМ КОАКСИАЛЬНОМ УСКОРИТЕЛЕ

На основе физического анализа процессов, происходящих в импульсных плазменных ускорителях, обосновывается возможность их использования для создания и исследования плазменного фокуса. В частности, изучено влияние индуктивности на параметры плазменного фокуса в установках типа «Плазменный фокус» (ПФ) килоджоулевого диапазона, создаваемых на основе импульсного коаксиального ускорителя. Предложена и обоснована эквивалентная схема установки, на основании анализа которой исследуется влияние индуктивности контура и ёмкости конденсаторной батареи на значение максимального тока и нейтронного выхода без учёта параметров разрядника и токопроводящих проводов. На основании теоретической оценки индуктивности установки рассчитано её наиболее вероятное значение. Оказалось, что в установках рассматриваемого диапазона энергии индуктивность составляет примерно 7,5·10-7 Гн и имеет зависимость от ёмкости конденсаторной батареи. Напротив, в установках с мегаджоулевой энергетикой индуктивность не зависит от числа и ёмкости конденсаторов, вследствие чего увеличение последней не влияет на рост силы тока. Получены экспериментальные и теоретические зависимости разрядного тока от приложенного напряжения при различных ёмкостях конденсаторной батареи. Приведён сравнительный анализ теоретических и экспериментальных осциллограмм тока. Обнаружено наибольшее совпадение теоретических и экспериментальных результатов при длительности разрядного импульса T = 30 мкс.

Ключевые слова: плазма, плазменный фокус, пинч, высоковольтный разрядник, разрядный ток, индуктивность, конденсатор, килоджоулевый диапазон.

B.M. Useinov*, A.A. Solodovnik, S.K. Zhumabayeva M. Kozybayev North Kazakhstan university, Kazakhstan, Petropavlovsk *e-mail: buseinov@gmail.com Effect of inductance on the parameters of the plasma focus in a pulsed coaxial accelerator

Based on the physical analysis of the processes occurring in pulsed plasma accelerators, the possibility of their use for the creation and study of a plasma focus is justified. In particular, the influence of inductance on the parameters of the plasma focus in kilojoule-range «Plasma focus» (PF) installations created on the basis of a pulsed coaxial accelerator is studied. An equivalent installation scheme is proposed and justified, based on the analysis of which the influence of the inductance of the circuit and the capacitance of the capacitor bank on the value of the maximum current and neutron output is analyzed, without taking into account the parameters of the spark gap and the conducting wires. Based on the theoretical estimate of the inductance of the installation, its most probable value is calculated. . It turned out that in the installations of the considered energy range, the inductance is approximately 7.5 • 10-7 Gn and depends on the capacitance of the capacitor bank. On the contrary, in installations with megajoule energy, the inductance does not depend on the number and capacity of capacitors, so that an increase in the latter does not affect the increase in current strength. Experimental and theoretical dependences of the discharge current on the applied voltage at different capacitances of the capacitor bank are obtained. A comparative analysis of theoretical and experimental current waveforms is presented. The greatest coincidence of theoretical and experimental results was found for the duration of the discharge pulse T = 30 microseconds.

Key words: plasma, plasma focus, pinch, high-voltage spark gap, discharge current, inductance, capacitor, kilojoule range.

Б.М. Усеинов*, А.А. Солодовник, С.К. Жұмабаева М. Қозыбаев атындағы Солтүстік Қазақстан университеті, Қазақстан, Петропавл қ. *e-mail: buseinov@gmail.com

Импульсті коаксиалды үдеткіштегі плазмалық фокусының параметрлеріне индуктивтіліктің әсері

Импульсті плазмалық үдеткіштерде жүретін процестерді физикалық талдау негізінде оларды плазмалық фокусты құру және зерттеу үшін пайдалану мүмкіндігі негізделген. Атап айтқанда, импульсті коаксиалды үдеткіш негізінде құрылған килоджоуль диапазонының «Плазмалық фокусы» (ПФ) типті қондырғылардағы индуктивтіліктің плазма фокусының параметрлеріне әсері зерттелген. Эквивалентті орнату схемасы ұсынылған және негізделген, оның негізінде тізбектің индуктивтілігінің және конденсатор батареясының сыйымдылығының максималды ток пен нейтрондық Шығыс мәніне разрядтаушы мен өткізгіш сымдардың параметрлерін ескерместен әсері талданады. Қондырғының индуктивтілігін теориялық бағалау негізінде оның ең ықтимал мәні есептеледі. Қарастырылып отырған энергия диапазонының қондырғыларында индуктивтілік шамамен 7,5·10-7 Гн құрайды және конденсатор батареясының сыйымдылығына тәуелді екендігі белгілі болды. Керісінше, мегаджоуль энергиясы бар қондырғыларда индуктивтілік конденсаторлардың саны мен сыйымдылығына байланысты емес, нәтижесінде соңғысының ұлғаюы ток күшінің өсуіне әсер етпейді. Конденсаторлық батареяның әртүрлі сыйымдылықтарында разряд тогының қолданылатын кернеуге эксперименттік және теориялық тәуелділігі алынады. Токтың теориялық және эксперименттік осциллограммаларына салыстырмалы талдау келтірілген. Т = 30 мкс разрядтық импульсінің ұзақтығы кезінде теориялық және эксперименттік нәтижелердің ең үлкен сәйкес келуі анықталды.

Түйін сөздер: плазма, плазмалық фокус, пинч, жоғары вольтты разрядтау құралы, разряд тогы, индуктивтілік, конденсатор, килоджоуль диапазоны.

Введение

В настоящее время активно развиваются прикладные физические исследования, нацеленные на практическое применение взаимодействия плазменного фокуса с поверхностью различных материалов с целью улучшения их эксплуатационных свойств. Реализация таких проектов связана с решением целого ряда технических и физических задач, одной из которой является исследование влияния индуктивности на параметры плазменного фокуса, формируемого в импульсном коаксиальном ускорителе.

Плазменными ускорителями (ПУ) называются устройства, формирующие квазинейтральные плазменные потоки с достаточно высокой энергией ионов. Сходные физические свойства с ПУ имеют классические газодинамические системы, ускорители заряженных частиц и плазмотроны [1].

В плазменном ускорителе можно получить потоки плазмы со скоростями $10-10^3$ км/с и более, что соответствует кинетической энергии ионов от ~10 эВ до 10^5-10^6 эВ. Тепловые процессы, ионизация и процессы возбуждения в плазменных ускорителях являются второстепенными, так как они свойственны скорее ускорителям полностью ионизованной плазмы [2].

Импульсные плазменные ускорители можно разделить на два основных типа: коаксиальные плазменные ускорители (КПУ) и рельсотронные ускорители. КПУ подразделяются, в свою очередь, на: ускорители с импульсным напуском газа, со сплошным наполнением газа и квазистационарные импульсные плазменные ускорители (ИПУ) [1].

В ИПУ формирование потока частиц происходит в несколько последовательных стадий, а образование плазмы состоит из ряда зон: плазменная перемычка в начальной стадии разряда, заполнение плазмой межэлектродного зазора, образование токового слоя и плазменного фокуса. Поэтому, теоретические модели, описывающие процесс ускорения плазмы в ИПУ, необходимо применять к определенной стадии формирования потока, а не к системе в целом [2].

Наиболее простой моделью описания процесса ускорения является электродинамическая модель. Согласно ей плазма имеет вид токопроводящей перемычки с сосредоточенной массой. Интегральная форма данной модели, учитывает явления захватывания и ускорения газа, распределенного по длине ускорителя (модель «снегоочистителя»), вклад в ускоряемую массу продуктов эрозии электродов, изменение сопротивления электрической цепи в процессе ускорения. Однако, электродинамическая модель не дает полноты адекватного описания основных физических процессов, происходящих в плазменных ускорителях.

Существуют режимы работ в ИПУ, сопровождающиеся возникновением плазменного фокуса за срезом электродов. Если коаксиальный ускоритель с положительной полярностью центрального электрода работает в режиме «снегоочистителя» (сгребание сгустка в объёме плазмопровода), то при выпадании токового слоя на срез электродов, он сжимается к оси, вблизи которого и возникает плазменный фокус [2].

Благодаря этому, импульсные плазменные ускорители можно отнести к установкам типа плазменный фокус, поскольку при определенных условиях на выходе из торца внешнего электрода ускорителя формируется сжимающийся к оси плазменный сгусток, или плазменный фокус.

Описание экспериментальной установки

Экспериментальная часть работы проводилась на модельном прототипе управляемого термоядерного реактора «Плазменный фокус», разработанного на основе импульсного коаксиального ускорителя, а компьютерное моделирование выполнялось с использованием программного языка C++, имеющего лучшие возможности для визуализации результатов исследования и быстрых расчетов.

Модель экспериментального термоядерного реактора «Плазменный фокус», выполненный на базе импульсного плазменного ускорителя включает камеру плазменного фокуса (ПФ), емкостный накопитель энергии, высоковольтный разрядник и систему токоподводов. В качестве емкостного накопителя энергии используется конденсаторная батарея из конденсаторов ИК-50-3 с напряжением 50 кВ и суммарной емкостью 72 мкФ [3]. Камера ПФ представляет собой электроразрядное устройство с мейзеровской (a,/a,>1), полусферической системой электродов. Внутренний электрод (анод) диаметром 25 мм изготовлен из меди, в центре анода имеется осевое отверстие диаметром около 5 мм. Внешний электрод (катод) диаметром 50 мм, также изготовлен из меди. Фотография электродной системы приведена на рисунке 1а.

В качестве вакуумной камеры, использовалась готовая камера от турбомолекулярного насоса ТМН-500 [4-5]. Внешний вид камеры приведен на рисунке 16. Наличие двух фланцев по 18 см и одного диаметром 30 см позволяет полностью реализовать требуемые условия для экспериментов. Толщина стенок камеры составляет более 1 см, предельный вакуум порядка 10⁻⁹ Торр.



Рисунок 1 – Фотографии электродной системы (а) и вакуумная камеры (б) экспериментального термоядерного реактора «Плазменный фокус»

Как отмечено выше, в установках ПФ мегаджоулевого диапазона при определении параметров объекта и исследовании разрядных процессов необходимо учитывать индуктивность всей плазменной установки, которая состоит постоянной индуктивности конденсатора и динамической индуктивности камеры [6]. Модель управляемого термоядерного реактора, изучаемая в нашей работе, относится к килоджоулевым установкам. В ней можно значительно сократить влияние постоянной индуктивности контура на величину разрядного тока, если поместить батарею конденсаторов в вакуумную камеру без разрядника и токопроводящих проводов, как показано на рисунке 2.



Рисунок 2 – Эквивалентная схема установки ПФ без разрядника и токопроводящих проводов

По данной схеме установка будет работать в следующей последовательности: вначале в вакуумную камеру напускается газ до определенного давления и затем постепенно подается напряжение. При определенном соотношении напряжения и давления в камере в соответствии с кривыми Пашена произойдет разряд и образуется плазма; при другом способе сначала подается напряжение на конденсаторную батарею и затем постепенно уменьшается до определенного давления и произойдет пробой с образованием газа [7-14].

Если пренебречь индуктивностью рабочей камеры и плазменного столба, то индуктивность разряда килоджоулевых установок ПФ, будет определяться только индуктивностью батареи и подводящих проводов. Для нахождения амплитуды тока для такого LC-контура, в приближении малости активного сопротивления пинча и подводящих кабелей, можно найти из выражения (1), полученного на основе анализа закона сохранения энергии для данной цепи:

$$I_m = \sqrt{\frac{CU_m^2}{L}} = U_m \sqrt{\frac{nC_1}{L}}$$
(1)

где С – емкость конденсаторной батареи, С $_{\rm l}$ – емкость одного конденсатора, п-число конденса-

торов, L – индуктивность конденсаторной батареи, проводящих проводов и проводов и плазмы. Таким образом, индуктивность всей системы складывается из постоянной индуктивности и её динамической составляющей $L = L_p + L_D$. Теоретическая оценка индуктивности в нашей модели дала значение 10⁻⁷ Гн.

Результаты и обсуждение

Расчеты, выполненные по формуле (1) для разного числа конденсаторов приведены на рисунке 3.

Из данных рисунка 3 следует 2 вывода: с увеличением напряжения ток растет почти линейно; чем больше емкость, тем больше сила тока.

Индуктивность всей системы можно выразить из формулы (2):

$$L = \frac{U^2 n C_1}{I_m^2} .$$
 (2)

Расчеты показывают, что с ростом емкости конденсаторной батареи (с увеличением числа конденсаторов) в два раза динамическая индуктивность увеличивается в среднем на 0,8 · 10⁻⁸ Гн.



Рисунок 3 – График зависимости силы тока от напряжения

В итоге индуктивность всей системы (сумма постоянной индуктивности конденсаторов и соединительных проводов равной на 6,5 · 10⁻⁷ Гн и динамической индуктивности плазмы равной 10⁻⁷ Гн) в реальном эксперименте должна быть 7,5·10⁻⁷ Гн. На рисунке 4 показано сравнение экспериментальных и теоретических результатов.



Рисунок 4 – Сравнение экспериментальных и теоретических результатов

Сравнение экспериментальных и теоретических результатов показало их удовлетворительное согласие. Расхождение в результатах можно отнести за счёт не учтёного вклада в индуктивность соединительных проводов и других второстепенных элементов установки. В килоджоулевом диапазоне увеличение емкости конденсаторной батареи ведет к увеличению силы тока, при том, что увеличение емкости конденсаторов лишь немного увеличивает индуктивность, стоящую в знаменателе формулы (1).

Увеличение емкости конденсаторной батареи влечет за собой увеличение продолжительности разряда, что требует увеличения геометрических размеров разрядной камеры. В результате индуктивность в разрядной камере становится преобладающей в установке и как, следствие увеличение емкости не влияет на рост силы тока, что и реализуется в установках с мегаджоулевой энергетикой.

В ходе эксперимента величина разрядного тока определялась поясом Роговского и рассчитывалась по формуле:

$$I = \frac{nU_0}{R}$$

где n – число витков катушки (n= 2000), U_0 – величина измеренного напряжения на выходе катушки, и R – сопротивление.

В ходе эксперимента получены осциллограммы тока и его производной, и определены теоретические значения амплитуды разрядного тока. Расчеты проводились по формуле:

$$I(t) = I_0 e^{-\alpha t} \sin \omega t \,. \tag{3}$$

Синусоиды разрядного тока и его производной, построенные по результатам расчета при $T_1=20$ мкс, $\omega=3,14\cdot10^5$ рад/с и сравнение экспериментальных и теоретических значений разрядного тока и его производной представлены на рисунке 5.

Установлено наилучшее совпадение теоретических и экспериментальных результатов при T=30 мкс. На рисунке 6 приведены сравнение экспериментальных значений и результатов расчета разрядного тока и его производной $T_2=30$ мкс, $\omega=2,09\cdot10^5$ рад/с.



Рисунок 5 – Сравнение экспериментальных и теоретических значений разрядного тока и его производной (T,=20 мкс)

Особенностью установок типа плазменный фокус является зависимость нейтронного выхода от энергии Е, запасенной в конденсаторной батареи, и соответственно, от величины разрядного тока в момент пинчевания І_р [15-20]. Эти зависимости можно представить в виде:

$$Y_n = 10E^2,$$
 (4)

$$Y_n = 2,5 \cdot I_m^4 L \tag{5}$$

Из уравнения (5) следует, что нейтронный выход для установок с килоджоулевой энерге-

тикой определяется величиной максимального тока разряда.

Изменение величины нейтронного выхода с ростом разрядного тока при различных значениях ёмкости конденсаторной представлена на рисунке 7.

На рисунке 7а показана зависимость нейтронного выхода от разрядного тока для установки с конденсаторной батареей емкостью 27 мкФ (9 конденсаторов), максимальный нейтронного выход составил 1,5·10⁹ нейтрон/импульс, на рисунке 76 – для батареи емкостью 54 мкФ (18 конденсаторов), максимальный нейтронный выход – 5,9·10⁹ нейтрон/импульс.



Рисунок 6 – Сравнение экспериментальных и теоретических значений разрядного тока и его производной (T₂=30 мкс)



Рисунок 7 – Зависимость нейтронного выхода от разрядного тока

Для мегаджоулевого диапазона нейтронный выход не зависит от энергии. При постоянном напряжении зарядки батареи рост энергии сопровождается увеличением количества конденсаторов, что приводит к падению индуктивности батареи. А увеличение емкости конденсаторной батареи приводит к увеличению длительности разряда и к увеличению длины электродов разрядной камеры, что является неизбежным для сохранения условия согласования момента прихода токовой оболочки к оси установки с максимумом тока [20-25]. В итоге соотношение между величинами L_c и L_t становится обратным килоджоульному диапазону, то есть $L_c << L_t$. Более того, при дальнейшем увеличении емкости батареи уже не происходит повышением тока разряда, вследствие увеличения индуктивности камеры. Максимальное значение тока разряда в этом случае определяется индуктивностью камеры, а не конденсаторной батареи. Происходит насыщение тока разряда, и соответственно насыщение нейтронного выхода.

Заключение

Таким образом, в статье предлагается эквивалентная схема исследования влияния индуктивности на параметры плазменного фокуса и приведены результаты эксперимента и теоретических расчётов. Показано, что в реальных экспериментальных установках килоджоулевого диапазона индуктивность составляет примерно 7,5.10-7 Гн. и зависит от ёмкости конденсаторной батареи, напротив, в установках с мегаджоулевой энергетикой индуктивность не зависит от числа конденсаторов. Некоторое расхождение экспериментальных данных и теоретических зависимостей силы тока от напряжения можно объяснить различием индуктивностей теоретической модели и установки. В работе установлена зависимость параметров плазменного фокуса от характеристик накопителя энергии и разрядника. На основе анализа осцилляций тока и его производной, определены значения амплитуды разрядного тока. Так амплитуда разрядного тока для одного конденсатора составляет 0,14 МА, а для 18 конденсаторов составляет 0,7 МА, в пределе возможно получение 1 МА и более. Изученный характер зависимости нейтронного выхода от тока разряда подтверждают теоретическую возможность нейтронного выхода при емкости 54 мкФ до Y₂=5,9·10⁹ нейтрон/импульс. Нейтронный выход для установок с килоджоулевой энергетикой определяется величиной максимального тока разряда.

Литература

1 Физика и применение плазменных ускорителей, под редакцией Морозова А.И. – Минск, 1974. – 400 с.

2 Баимбетов Ф.Б., Усеинов Б.М. Импульсные коаксиальные плазменные ускорители и методы диагностики плазменных потоков [Электр.pecypc]: view pdf. – Режим доступа: https://inis.iaea.org/collection/NCLCollectionStore/_Pub-lic/33/019/33019316.pdf

3 Жукешов А.М., Ибраев Б.М., Гиниятова Ш.Г., Амренова А.У. Разработка разрядной камеры экспериментальной установки «Плазменный фокус» // Вестник ЕНУ. – 2016. – №2. – С. 386–389.

4 Zhukeshov A.M., Ibraev B.M., Giniyatova Sh.G., Useinov B.M., Nikulin V.Ya., Gabdullina A.T., Amrenova A.U. Parameters calculation and design of vacuum camera for «Plasma focus» facility // International Journal of Mathematics and Physics. – 2016. – Vol 7, №1. – P. 137-140.

5 Zhukeshov A.M., Amrenova A.U., Gabdullina A.T., Moldabekov Zh.M., Useinov B.M. Calculation and Analysis of Electrophysical Processes in a High-Power Plasma Accelerator with an Intrinsic Magnetic Field 2019 // Zhurnal Tekhnicheskoi Fiziki. – 2019. – Vol. 89, No. 3. – P. 378–383.

6 Крауз В.И., Войтенко Д.А., Митрофанов К.Н., Мялтон В.В., Аршба Р.М., Астапенко Г.И., Марколия А.И., Тимошенко А.П. Исследование параметров плазменных потоков и их распространения в фоновой плазме в установках типа «плазменный фокус» с различной конфигурацией разрядной системы // ВАНТ. Серия термоядерный синтез. – 2015. – Т. 38. – Вып. 2. – С. 19-31.

7 Усеинов Б.М., Солодовник А.А., Алимова Н.М., Жукешов А.М., Ибраев Б.М., Амренова А.У., Габдуллина А.Т., Молдабеков Ж.М. Модель солнечной вспышки в рамках управляемого термоядерного реактора «Плазменный фокус». // Журнал проблем эволюции открытых систем. – 2019. – Т. 2, вып. 21. – С. 31-40.

8 Волобуев И.В., Крюков Л.Х., Никулин В.Я., Полухин С.Н. Влияние конфигурации разрядной камеры плазменного фокуса на нейтронный выход. //Краткие сообщения по физике ФИАН. – 2012. – №10. – С. 20-27.

9 Никулин В.Я., Полухин С.Н. О насыщении нейтронного выхода плазменных фокусов в мегаджоульном диапазоне. //Физика плазмы. – 2007. –Т. 33., № 4. – С. 304-310.

10 Никулин В.Я., Полухин С.Н. К вопросу о нейтронном скэйлинге плазменного фокуса. Электротехнический подход. – М., 2006. – 18 с.

11 Дулатов А.К., Лемешко Б.Д., Михайлов Ю.В., Прокуратов И.А., Селифанов А.Н. Экспериментальное изучение параметров жесткого рентгеновского излучения установок плазменного фокуса. // ВАНТ. Сер. Термоядерный синтез. – 2016. – Т. 39. – Вып. 3. – С. 66-72.

12 Волобуев И.В., Гурей А.Е., Никулин В.Я., Полухин С.Н. Магнито-зондовые и нейтронные измерения на плазменном фокусе ПФ-400. //Физика плазмы, 2010. – Т. 36, № 12. – С. 1075–1084.

13 Lerner E.J., Murali S.K., Hapoub A. Preliminary experimental results from a new megamp dense plasma focus //IEEE 37th International Conference on Plasma Sciences, 2010. – P. 211-215.

14 Майоров А.Н., Никулин В.Я., Огинов А.В., Жукешов А.М. Исследование аксиальных плазменных потоков в установке типа плазменный фокус ПФ-4. //Краткие сообщения по физике ФИАН. – 2015. – №7. – С. 3-13.

15 Никулин В.Я., Старцев С.А., Цыбенко С.П. Стационарные цилиндрические структуры в пинчевых разрядах. // Краткие сообщения по физике Физического института им. П.Н. Лебедева Российской Академии Наук. – 2015. – № 5. – С. 21–26.

16 Дулатов А.К., Лемешко Б.Д., Михайлов Ю.В., Прокуратов И.А., Селифанов А.Н. Измерение динамической индуктивности камер плазменного фокуса. // Успехи прикладной физики. – 2013. – Т. 1, № 4. – С. 559-563.

17 Scholz M. Plasma-focus and controlled nuclear fusion. Habilitation dissertation. Kraków: Institute of Nuclear Physics PAN. – 2014. – 146 p.

18 Савелов А.С., Салахутдинов Г.Х., Колтунов М.В., Лемешко Б.Д., Юрков Д.И., Сидоров П.П. Исследование импульсного рентгеновского излучения плазменного фокуса в широком энергетическом диапазоне. //Прикладная физика. – 2010. – №4. – С. 52-55.

19 Полухин С.Н., Джаманкулов А.М., Гурей А.Е., Никулин В.Я., Перегудова Е.Н., Силин П.В. Измерение лазернооптическим методом скорости плазменных струй, генерируемых в килоджоульном Плазменном фокусе для различных газов. //Физика плазмы. – 2016. – Т. 42. – Вып. 12. – С. 54-60.

20 Morad R.I., Jassim M.K., Majeed R.H. A Theoretical Design of Plasma Focus and its Achievements. //Journal of Chemical, Biological and Physical Sciences. – Vol. 4, No. 3. – 2014. – P. 576-587.

21 Юрков Д.И., Дулатов А.К., Лемешко Б.Д., Андреев Д.А., Голиков А.В., Михайлов Ю.В., Прокуратов И.А., Селифанов А.Н., Фатиев Т.С. Установка плазменного фокуса с током до 2 МА как источник жесткого рентгеновского излучения. // Успехи прикладной физики. – 2017. – Том 5. – № 1. – С. 45-53.

22 Грибков В.А., Боровицкая И.В., Демин А.С., Масляев С.А., Морозов Е.В., Пименов В.Н., Бондаренко Г.Г., Гайдар А.И. Исследование повреждаемости материалов с использованием установки типа плазменный фокус «Вихрь». Заводская лаборатория. //Диагностика материалов. – 2019. – Т.85. – №8. – С. 29-36.

23 Михайлов Ю.В., Лемешко Б.Д., Прокуратов И.А. Экспериментальные зависимости выхода нейтронного излучения камер плазменного фокуса от разрядного тока для дейтериевого и дейтерий-тритиевого наполнений. //Физика плазмы. – 2019. – Т. 45. – № 4. – С. 323-334.

24 Epifanov N.A., Bondarenko G.G., Gribkov V.A., Latyshev S.V., Nikitushkina O.N., Pimenov V.N. Action of shocks generated in solid targets by dense plasma focus devices and at pulsed laser irradiation. //Procedia Manufacturing, 2019, vol. 37, pp. 500–507.

25 Боровицкая И.В., Грибков В.А., Демин А.С., Епифанов Н.А., Латышев С.В., Масляев С.А., Морозов Е.В., Пименов В.Н., Сасиновская И.П., Бондаренко Г.Г., Гайдар А.И., Шольц М. Повреждаемость и деформационные эффекты в поверхностных слоях меди и сплава системы медь-галлий при импульсном облучении в установке Плазменный фокус. // Перспективные материалы. – 2020. – № 5. – С. 23-36.

References

1 Fizika i primeneniye plazmennykh uskoriteley, pod redaktsiyey A.I. Morozova (Minsk, 1974), 400 s. (in Russ).

2 F.B. Baimbetov, B.M. Useinov, Impul'snyye koaksial'nyye plazmennyye uskoriteli i metody diagnostiki plazmennykh potokov [Elektr.resurs]: view pdf. Access mode: https://inis.iaea.org/collection/NCLCollectionStore/_Public/33/019/33019316.pdf (in Russ).

3 A.M. Zhukeshov, B.M. Ibraev, et al, Bulletin of ENU, 2, 386-389 (2016). (in Russ).

4 A.M. Zhukeshov, B.M. Ibraev, et.al, International Journal of Mathematics and Physics, 7 (1), 137-140 (2016).

5 A.M. Zhukeshov, A.U. Amrenova, et.al., Zhurnal Tekhnicheskoi Fiziki, 89 (3), 378-383 (2019).

6 V.I. Krauz, D.A. Voitenko, et.al., VANT. Thermonuclear fusion series, 38 (2), 19-31 (2015). (in Russ).

7 B.M. Useinov, A.A. Solodovnik, et al., Journal of Problems of the Evolution of Open Systems, 2 (21), 31-40 (2019). (in Russ).

8 I.V. Volobuev, L.Kh. Kryukov, et.AL., Brief communications on physics FIAN, 10, 20-27 (2012). (in Russ).

9 V.Ya. Nikulin and S.N. Polukhin, Plasma physics, 33 (4), 304-310 (2007). (in Russ).

10 V.Ya. Nikulin and S.N. Polukhin, K voprosu o neytronnom skeylinge plazmennogo fokusa. Elektrotekhnicheskiy podkhod, (Moscow, 2006), 18 p. (in Russ).

11 A.K. Dulatov, B.D. Lemeshko, et.al., VANT. Ser. Thermonuclear fusion, 39 (3), 66-72 (2016). (in Russ).

12 I.V. Volobuev, A.E. Gurei, et.al., Plasma Physics, 36 (12), 1075-1084 (2010). (in Russ).

13 E.J. Lerner, S.K. Murali, A. Hapoub, Preliminary experimental results from a new megamp dense plasma focus, IEEE 37th International Conference on Plasma Sciences, 211-215 (2010).

14 A.N. Mayorov, V.Ya. Nikulin, et.al., Brief communications on physics FIAN, 7, 3-13 (2015). (in Russ).

15 V.Ya. Nikulin, S.A. Startsev and S.P. Tsybenko, Brief communications on physics of the Physics Institute. P.N. Lebedev of the Russian Academy of Sciences, 5, 21-26 (2015). (in Russ).

- 16 A.K. Dulatov, B.D. Lemeshko, et.al., Advances in Applied Physics, 1 (4), 559-563 (2013). (in Russ).
- 17 M. Scholz, Habilitation dissertation, (Kraków: Institute of Nuclear Physics PAN, 2014), 146 p.
- 18 A.S. Savelov, G.Kh. Salakhutdinov, et.al., Applied Physics, 4, 52-55 (2010). (in Russ).
- 19 S.N. Polukhin, A.M. Dzhamankulov, et.al., Plasma Physics, 42 (12), 54-60 (2016). (in Russ).
- 20 R.I. Morad, M.K. Jassim and R.H. Majeed, Journal of Chemical, Biological and Physical Sciences, 4 (3), 576-587 (2014).
- 21 D.I. Yurkov, A.K. Dulatov, et.al., Advances in Applied Physics, 5 (1), 45-53 (2017). (in Russ).
- 22 V.A. Gribkov, I.V. Borovitskaya, et.al., Industrial laboratory. Diagnostics of materials, 85 (8), 29-36 (2019). (in Russ).
- 23 Yu.V. Mikhailov, B.D. Lemeshko and I.A. Prokuratov, Plasma physics, 45 (4), 323-334 (2019). (in Russ).
- 24 N.A. Epifanov, G.G. Bondarenko, et.al., Procedia Manufacturing, 37, 500-507 (2019).
- 25 I.V. Borovickaya, V.A. Gribkov and A.S. Demin, Advanced Materials, 5, 23-36 (2020). (in Russ).

FTAMP 55.21.99

https://doi.org/10.26577/RCPh.2021.v78.i3.08

К.К. Комбаев¹* ⁽¹⁾, Д.С. Еламанов¹ ⁽¹⁾,

А.Б. Касенова¹, Д.С. Қамзин², Г.М. Токтарбаева¹

¹ Д. Серікбаев атындағы Шығыс Қазақстан техникалық университеті, Қазақстан, Өскемен қ. ² «Өскемен өнеркәсіптік арматура зауыты» АҚ, Қазақстан, Өскемен қ. *e-mail: kombaev82@mail.ru

ЭЛЕКТРОЛИТТІ-ПЛАЗМАЛЫҚ МОДИФИКАЦИЯДАН КЕЙІН Төмен көміртекті болаттың беткі қабатының құрылымдық-фазалық жағдайы

Төмен көміртекті легірленген болатты электролитті плазмалық модификациямен нығайтудың балама технологиясы жасалды. 20Х болат үлгілерін өңдеу эксперименттік қондырғыда жүргізілді, өңдеудің оңтайлы режимдері эмпирикалық түрде анықталды. Өңделген бетті модельдеу бөлшектерді электролитті плазмалық қыздыру кезінде қатайтумен қатар металдың беткі қабаттарының химиялық модификациясы жүреді деп болжауға мүмкіндік береді. Ұсынылған өңдеуге нақты уақытты қолданумен вольт температурасының сипаттамасы ұқсас болатты нығайтудың дәстүрлі әдістерімен салыстырмалы түрде қатайту уақытының едәуір төмендегенін айқын көрсетеді. Сондай-ақ, энергия шығыны едәуір төмендейді, сәйкесінше бөлшек пен өнімнің өзіндік құны. Электролит-плазмалық модификация ірі түйіршікті перлит-ферритті микрокурылымды мартенситке айналдыруға ықпал етеді. Бастапқы күйге қатысты қаттылықтың жоғарылауы электролит-плазмалық өңдеуден кейін физика-механикалық қасиеттердің жоғарылауын көрсетеді. Электролитті-плазмалық өңдеу әдісінің артықшылығы жоғары беріктендіру жылдамдығы кезінде аз энергия шығындарынан, жер бетін жергілікті өңдеу мүмкіндіктерінен тұрады, балама электролитті-плазмалық беріктендіру үшін жартылай өнеркәсіптік кондырғы құруға алғышарттар бар. Ғылыми зерттеу нәтижелері электролитті плазмалық өңдеу нәтижесінде болаттың фазалық өзгеріске әкелетінін көрсетеді. Болаттың беткі қабаты көміртекпен қанығатыны байқалады. Беткі қаттылықтың ұлғаюы металдың қолдану мерзімін ұлғайтатыны анык.

Түйін сөздер: электролитті-плазмалық модификация, мартенсит, микроқұрылым, қатаю, қаттылық.

K.K. Kombaev^{1*}, D.S. Elamanov¹,

A.B. Kassenova¹, D.S. Kamzin², G.M. Toktarbaeva¹ ¹D. Serikbayev East Kazakhstan technical university, Kazakhstan, Ust-Kamenogorsk ²Ust-Kamenogorsk Industrial Valves Plant JSC, Kazakhstan, Ust-Kamenogorsk

*e-mail: kombaev82@mail.ru

Structural-phase state of the surface layer of low-carbon steel after electrolytic-plasma modification

An alternative technology of strengthening by electrolytic-plasma modification of low-carbon alloy steel for the wedge columns binding for stop valves has been developed. The processing of steel 20X samples was carried out on an experimental installation, the optimal processing modes were determined experimentally. Simulation of the treated surface makes it possible to assume that during the electrolytic-plasma heating of parts, along with quenching, chemical modification of the metal surface layers occurs. The volt-temperature characteristic with the superposition of real time on the proposed processing clearly shows a significant reduction in the time for hardening, relative to traditional hardening methods of similar steel. Also, energy consumption and, accordingly, the cost of the part and the product as a whole are significantly reduced. Electrolyte-plasma modification promotes the transformation of coarse-grained pearlite-ferrite microstructure into quenched martensite. An increase in hardness relative to the initial state indicates an increase in physical and mechanical properties after electrolyte-plasma treatment. The advantage of the method of electrolytic-plasma treatment consists in low energy consumption at high quenching rates, the possibility of local surface treatment; there are prerequisites for creating a semi-industrial installation for an alternative electrolyte-plasma hardening.

Key words: Electrolyte-plasma modification, martensite, microstructure, hardening, hardness.

К.К. Комбаев^{1*}, Д.С. Еламанов¹,

А.Б. Касенова¹, Д.С. Камзин², Г.М. Токтарбаева¹

¹Восточно-Казахстанский технический университет им. Д. Серикбаева, Казахстан, г.Усть-Каменогорск ²АО «Усть-Каменогорский завод промышленной арматуры», Казахстан, г. Усть-Каменогорск ^{*}e-mail: KOMBAEV82@MAIL.RU

Структурно-фазовое состояние поверхностного слоя низкоуглеродистой стали после электролитно-плазменной модификации

Разработана альтернативная технология упрочнения электролитно-плазменной модификацией низкоуглеродистой легированной стали обвязки колонн клиновых для запорной арматуры. Обработку образцов стали 20Х проводили на экспериментальной установке, опытным путем определили оптимальные режимы обработки. Моделирование обработанной поверхности дает возможность предположить, что при электролитно-плазменном нагреве деталей наряду с закалкой происходит химическая модификация поверхностных слоев металла. Вольттемпературная характеристика с наложением реального времени на предлагаемую обработку наглядно показывает о значительном снижении времени на упрочнение, относительно традиционными методами упрочнения аналогичной стали. Также значительно снижаются энергозатраты и, соответственно, себестоимость детали и изделия в целом. Электролитноплазменная модификация способствует превращению крупнозернистой перлитно-ферритной микроструктуры в мартенсит закалки. Увеличение твердости относительно исходного состояния свидетельствует о повышении физико-механических свойств после электролитно-плазменной обработки. Преимущество способа электролитно-плазменной обработки состоит в малых энергозатратах при больших скоростях закалки, возможности локальной обработки поверхности, имеются предпосылки для создания полупромышленной установки для альтернативного электролитно-плазменного упрочнения. Результаты исследования свидетельствуют о фазовом превращении стали, модификации поверхности углеродом, а также о повышении твердости, что, несомненно, приведёт к повышению долговечности.

Ключевые слова: электролитно-плазменная модификация, мартенсит, микроструктура, упрочнение, твердость.

Кіріспе

Қазақстандық машина жасау саласының алдында тұрған маңызды мәселе – инновациялық технологияларды енгізу және машина жасау кешенін жедел жаңғырту. Қазақстанның машина жасау құрылымында ішкі сұранысты қамтамасыз ететін тау-кен металлургия және мұнай-газ секторы үшін өнім өндірісі басым [1]. Қазақстанның машина жасау кәсіпорындарының бір бағыты құбыр арматурасын және мұнай кәсіпшілігі жабдықтарын өндіру болып табылады. Бекіту арматурасының номенклатурасы механикалық өңдеу арқылы жасалады, корпус бөліктері дәнекерленген-штампталған құрылымды білдіреді, сондықтан көп жағдайда төмен көміртекті легірленген болаттар қолданылады. Сына бағаналарының байламдары – оларды ілу, олардың арасындағы сақиналық кеңістікті герметизациялау және ондағы қысымды бақылау мақсатында іргелес бағандардың жоғарғы ұштарын байлауға арналған. Мұнай айдау процесінде сына бағаналарының жабдықтарын (СБЖ) байлау жоғары түйіспелі кернеулерге және соққы-шаршау тозуына ұшырайды. 20Х төмен көміртекті болаттан (МЕМСТ 33260-2015) жасалған СБЖ плашкаларын беріктендіру дәстүрлі тәсілмен - электр пештерінде кейіннен шынықтыра отырып, қатты карбюризаторда (ағаш көмір) цементтеумен қамтамасыз етіледі [2]. Алайда, бұл процесс жоғары жылу шығындарымен, ПӘК төмендетумен, үлкен уақыт шығындарымен (әсіресе пешті қажетті температураға дейін қыздырғанда), жоғары энергия тұтынумен (қуат шығыны 60-100 кВт құрайды) ілесіп жүреді [3]. Көміртектің ену жылдамдығы төмен, ал тереңдігі 1-2 мм, карбюризатордағы дайындаманы белгілі бір температурада 8-10 сағат қыздыру қажет, содан кейін қатайтылады [4]. Қазіргі уақытта термиялық, механикалы-термиялық өңдеудің дәстүрлі әдістерімен қатар жоғары энергиялы жергілікті қатайту әдістері кеңінен қолданылуда. Ұсынылған жұмыста мұнай-газ арматурасына арналған төмен көміртекті болатты диффузиялық қанықтырудың электролитті-плазмалық процесі қарастырылған. Қанықтыру ұзақтығы бірнеше минутты алады және қайта қыздырусыз сол электролитте сөндірумен оңай үйлеседі.

Жұмыстың мақсаты – әзірленген режимді қолдана отырып, төмен көміртекті легірленген
болаттың электролитті-плазмалық модификациясының (бұдан әрі – ЭПМ) өңделетін беттің өнімділігіне, өңдеу тиімділігіне, сапасына, сондай-ақ құрылымы мен қасиеттеріне әсерін зерттеу.

Тәжірибенің материалдары, жабдықтары және әдістемесі

ЭПМ орындау үшін 1 диэлектрлік жұмыс ваннасын, диаметрі 2 мм 7 көлденең тесіктері бар цилиндрлік пластина түріндегі 3 анод қамтитын арнайы әзірленген тәжірибелік қондырғы 1а-суреті қолданылды [5]. Анод 4 конустық саптамаға салынған, ал 5 катод ретінде қатайтылған үлгі/бөлік қолданылады. Резервуардан 8 штуцер арқылы 4 саптамаға 10% кальцийленген сода электролит беріледі. Кері берілісті өңдеу кезінде резервуарға 2 түтік арқылы айналады. Куат көзі катод пен сұйық электролит арасында қосылған кезде бу-газ қабығы пайда болады, ол пленкалы қайнатумен бірге жүреді [6]. Осы қысқа уақыт аралығында электролиттің құрамдас бөліктері иондалады және электролит плазмасы қозғалады, 16-суреті. Өздеріңіз білетіндей, плазманың температурасы құрылымдық фазалық өзгеру температурасы құрылымдық фазалық өзгеру температурасынан едәуір асады, сондықтан біз электролитті-плазмалық өңдеу режимдерін тәжірибелік жолмен анықтадық. Сөндіру электролит ағынында жүзеге асырылады, циклдік өңдеу кезінде жақсы нәтижеге қол жеткізіледі [7].

Зерттеулер 20Х болаттан жасалған үлгілерінде (с 0.17-0.23%; Si 0.17-0.37%; Mn 0.5-0.8%; Cr 0.7-1.0%, MEMCT 33260-2015), өлшемдері 10х10х25 мм, жүргізілді.



а) ЭПМ саптама сұлбасы

б) ЭПМ қондырғысы



1-сурет – Зерттеу жүргізуге арналған тәжірибелік қондырғы

Металлографиялық талдауға, электронды микроскопиялық зерттеулерге арналған үлгілер алдын-ала тегістеуден, жылтыратудан және өңдеуден өтті. Осы мақсаттар үшін өңделген үлгілер жуудан және кептіруден кейін эпоксидті шайырмен пластиктен немесе металдан жасалған қалыпқа құйылып, айна жылтырына дейін тегістеліп, жылтыратылды. Одан әрі болат үлгілерінің жылтыратылған беті: 5-7 С ішінде этил спиртіндегі азот қышқылының 5% ерітіндісімен (Курпатов реактиві) өңделді [8]. Дәрілену дәрежесі микроскопта этил спиртімен бекітумен және ағынды суда жуумен бақыланды. Субстратты металлографиялық зерттеу «Sony» сандық камерасы бар «Axioscop – 2MAT» шағылысқан жарықтың инверттелген фотомикроскопында жүргізілді [9]. Қаттылықты өлшеу СТ СЭВ 469-77 және ИСО 6508-86 талаптарына сәйкес Роквелл әдісі бойынша жүргізілді. Индикатор ретінде 120° бұрышпен конустық алмаз ұшы қолданылды, мәні 0,5 қаттылық бірлігіне дейін дөңгелектенді [10].

Тәжірибелік нәтижелер және оларды талқылау

Бастапқы (ыстықтай илектелген) күйде болаттың 20Х микроқұрылымы ірі түйірлі перлит-феррит құрылымын білдіреді (2-сурет). Феррит және перлит түйірлерінің формалары цементит фазасын құрайтын темір карбидінің жұқа қабығымен жабылған. Хромның легірлеуші элементтері болаттың бүкіл көлемінде ұсақ дисперсті улестірімге ие. Төмен көміртекті болаттарда феррит басым болады, ал перлит түйірлері аз үлесті құрайды. Пешпен (баяу және ұзақ) қыздыру кезінде перлит дәндерінде шоғырланған көміртек диффузия нәтижесінде металдың бүкіл көлеміне біркелкі таралады [11]. Оның концентрациясы перлит дәндеріндегі концентрациямен салыстырғанда (0,8%) 0,1-0,2% маркалы мәнге дейін төмендейді [12]. Бұл төмен көміртекті болаттардың пешті қыздырудан қатайту кезінде тиімді қатаюына жол бермейді.



2-сурет – 20Х болаттың микроқұрылымы бастапқы күйінде, оптикалық микроскопия, х 200

Сондықтан, төмен көміртекті легірленген болаттан жасалған ОКК плашкаларын нығайту үшін қатты карбюризаторда көміртекпен цементтеу арқылы беттік қанықтыру жүзеге асырылады, содан кейін қатайтылады [13]. Бұл термиялық өңдеу процесі өте ұзақ, уақытты қажет ететін және энергияны қажет етеді.

Плазмалық қатайту технологияларын дамыту төмен көміртекті болаттарды нығайту туралы қалыптасқан көзқарастарды қайта қарауға мумкіндік береді. ЭПМ процестері бір цикл процесінің нақты уақытын қолдана отырып, вольт-температуралық сипаттамамен жақсы сипатталады (3-сурет). Егер резервуардан саптамаға және жұмыс ваннасы арқылы электролит бөлме температурасында, шамамен 20°С айналғанын ескерсек, онда плазма бірнеше секундта қоздырылды [13]. Төмен кернеулерде (АВ бөлігі) электролитке батырылған катод қарсылықты сезінеді. Үлгінің кедергісін оқшаулау есебінен кернеудің артуы электролитпен жанасу аймағында ерітіндінің қайнағанға дейін қызуына және токтың үзілуінің туындауына (эк учаскесі) экеледі. Қисықтың осы бөлігінде конденсацияның мерзімді процестеріне және катод/дайындаманың айналасында бу қабатының пайда болуына байланысты токтың импульсті сипаты байқалады [14]. Бұл жағдайда жарылумен және жарқылмен бірге ұшқынның пайда болуы тән. С нүктесіндегі электролитті плазма тұрақтылыққа ие болады және температура жоғарылайды, жүйе қыздыру режиміне өтеді (CD бөлімі). Бұл жағдайда электролитті плазмада бөлінетін қуаттың артуына байланысты кернеудің 150-200 В дейін жоғарылауымен температура жоғарылайды [15].

DE бөлігі үшін электролиттің салқындауынан туындаған катод температурасының күрт төмендеуі тән. ЭПО процесінің ең маңызды сипаттамалары температура мен қыздыру жылдамдығы болып табылады. Қыздырудың жоғары жылдамдығы ЭӨҰ-ны химиялық-термиялық өңдеудің жылдам тәсілдеріне жатқызады [16]. Сонымен, тұрақты кернеу мәні бар ЭПО катодтық нұсқасы үшін бөліктің қыздыру жылдамдығы 200 градус/с дейін жетеді [17], ал анод үшін – 250 градус/с дейін [18]. Қыздыру температурасы негізінен қолданылатын кернеудің мөлшеріне, электродтың мөлшеріне, электролиттің температурасы мен жылдамдығына байланысты. Анод температурасының жылу режимінде қолданылатын кернеудің шамасына тәуелділігі [18]. Анод диаметрінің ұлғаюы тұрақты кернеу кезінде оның температурасының төмендеуіне экеледі, ал биіктіктің жоғарылауы (батыру тереңдігі), керісінше, температураның жоғарылауына экеледі [19]. Бұл жүйеде жылу ағындарының таралу ерекшеліктеріне байланысты. Сонымен, Na2CO3 ерітіндісіндегі плитадан үлгіні қыздырудың максималды температурасы электролиттің ең төменгі температурасында, ал ең төменгі қыздыру температурасы электролиттің ең жоғары температурасында болды.

Дәл осы режимде үлгі/бөлік 840-860°С температураға дейін қызады, яғни 20Х болаттың катодты фазалық түрленуі үшін жеткілікті [20].



3-сурет – Бір цикл уақыт интервалындағы ЭПМ вольт-температуралық сипаттамасы

Өндірістік жағдайларда аз көміртекті болаттың бетін көміртекпен қанықтыру және ұқсас микроқұрылым үлкен энергия шығындарымен едәуір ұзақ уақыт аралығында алынады [21]. Айта кету керек, ЭПМ циклдік өңдеу арқылы жүзеге асырылды, барлығы 4 минут ішінде. Плазмалық қыздыру аралығы 4 секундты құрайды, электролит ағынындағы сөндіру 4 секундты құрайды және тиісінше циклдар саны 30-ға тең [22]. Бұрынырақта ЭПМ өңдеудің оңтайлы режимдерін тәжірибелік анықтау және электролит пен анодтың Na₂CO₂ компоненттерінің ыдырау иондарынан металды көміртегімен қанықтыру туралы зерттеулер жарияланды. Болаттың көміртегімен және басқа элементтермен диффузиялық қанығуы тек электролиттен ғана емес, сондай-ақ біз 12Х18Н10Т тот баспайтын болатты пайдаланған анод элементтерінен де мүмкін [23].

Катод бетіндегі электр өрісінің көміртегі аниондарының берілуіне оң әсері туралы гипотезалар бар (5-сурет). ЭПМ үшін электролиттер құрамына қойылатын талаптар бірнеше шарттармен анықталады. Ең алдымен, бөлшектердің тиімді көміртегі диффузиясы үшін жеткілікті температураға дейін қызуын қамтамасыз ету қажет. Шешім ЭПМ құруды қамтамасыз ететін ең аз электр өткізгіштікке ие болуы керек. Әр Электролитті-плазмалық модификациямен өңделген 20Х болат үлгісінің микроқұрылымы шыңдаудың инелі мартенситінің болуын куәландырады (4-сурет).



Көрсеткішпен іздер мен қаттылық мәндері көрсетілген, х 200.

4-сурет – 20Х болаттың электролитті-плазмалық модификациядан кейінгі жоғары бетінің микроқұрылымы, U = 200 B, t = 4 мин.

түрлі электролиттердің қанықтыру қабілеті көміртегі бар компоненттердің ыдырау реакцияларымен және осы ыдырау өнімдерінің өңделген бетке адсорбциясымен анықталады [24].

Электролит айналымының жылдамдығы араластыру және салқындату қарқындылығын, үлгінің қатаюын анықтайды [25]. Конустық саптамадағы гидродинамикалық жағдайларға байланысты катодты аймақтағы жылу алмасу заңдылықтары қаныққан компоненттердің шығарылатын өнімнің бетіне шығарылуы мен берілуінің ерекшеліктеріне айтарлықтай әсер етеді. Бұл заңдылықтар электролиттердің құрамына да байланысты, олар өңдеу режимдерімен бірге ЭПМ кейін алынған материалдардың қасиеттерін анықтайды.

Плазманың жоғары концентрацияланған температурасы көміртектің жоғары концентрациясы бар карбид бөлшектерінің субстратына өтетін беткі қабаттың шамалы қабатын құрайды (5-сурет). Электролит ағынындағы циклдік қатаю болаттың микроқұрылымына термиялық әсер ету аймағын жасайды. Бұл аймақта жұқа инелі мартенситтің пайда болуымен фазалық өзгеріс жүреді. Учаскелердің айқын шекаралары жоқ, бірақ қатайған қабаттың жалпы тереңдігі 2 мм-ге жетеді, ол бастапқы перлит-феррит құрылымына біртіндеп өтеді [26].



5-сурет – Үлгі/бөлшек бетінің электролит-плазмалық модификация моделі

Колданылатын кернеуді өзгерте отырып, үлгінің аз мөлшерін ескере отырып, катодтың температурасын тез басқаруға болады – өңделген өнім 400-ден 1100 °С-қа дейін [27], бұл температураның қолданылатын кернеудің шамасына сызықтық тәуелділігімен сипатталады [28]. Электролит-плазмалық қыздырудың жоғары жылдамдығы үлгінің/бөліктің берілген температурасына жету уақытын қысқартып қана қоймайды, сонымен қатар процестің кейбір кезеңдеріне жағымды әсер ете отырып, диффузиялық қабаттардың пайда болуын тездетеді. Баяу қыздыру астықтың өсуіне жағдай жасайды, ал жоғары жылдамдықта диффузияны тездету үшін температураның жоғарылауы мүмкін.

Роквелл қаттылығын өлшеу нәтижелері HRC20-24 бастапқы мәніне қатысты беттік қаттылықтың HRC 41-45-ке дейін жоғарылауын анықтады (6-сурет). ЭПМ өңдегеннен кейін қаттылықтың таралуы 20Х болаттағы көміртегі концентрациясының таралуымен толығымен байланысты және электролиттердің қанықтыру қабілетіне сәйкес келетін эвтектоидты болатқа сәйкес келеді [29]. Бұл көміртектің максималды жалпы концентрациясына байланысты, ол қаныққан температурада аустенитте қаныққан ерітінді және қатаюдан кейін мартенсит түзеді.



6-сурет – 20Х болат бетінің қаттылығының салыстырмалы графигі

Құрамында 10% кальцийленген сода бар электролиттегі құрылымдық болаттардың катодты циклдік қатаюы 840-860 °С температурада 4 минут ішінде олардың қаттылығын 2 есе арттыруға мүмкіндік береді, бұл кейіннен қатайтумен қатты карбюризаторда цементтелгеннен әлдеқайда аз. Сонымен қатар, термиялық өңдеу уақытын азайту мүмкіндігі көрсетілген, бұл өз кезегінде өнеркәсіптік пешті жылытуға энергия шығынын азайтады және тұтастай алғанда бөлшектерді өндірудің өзіндік құнын төмендетеді.

Тесіп өтетін қыздыруды болдырмау және сынғыштықты арттыру үшін электролит ағындарымен фазалық түрлендіру температурасына дейін циклдық шыңдаумен ЭПМ жүргізу ұсынылады, ол тәжірибелік жолмен анықталған және эксперименттерді жоспарлау есебімен расталған [30].

Осылайша, дамыған ЭПМ технологиясы зерттеушілерді қызықтырады, өйткені физикамеханикалық қасиеттердің көрсеткіштері болатты қатайтудың дәстүрлі әдістерінен еш кем түспейді. Жаңа технологияны енгізу электролиттік-плазмалық шынығу табиғаты туралы жаңа ақпарат алуға мүмкіндік береді. Практикалық қолдану тұрғысынан ЭПМ механизмі электролиттердің өңдеу режимдері мен құрамын дұрыс таңдау үшін, сондай-ақ қажетті жабдықты құру үшін қажет.

Қорытынды

1. ЭПМ нақты уақыт қабаттасуымен Вольттемпературалық сипаттамасы дайындаманың жоғары температуралы электролиттік плазмадан қыздыру уақыты 4 минутты құрайтындығын көрсетеді, бұл дәстүрлі цементтеуге, содан кейін қатайтуға кететін уақыттан едәуір аз.

2. Үлгібетініңүлгісұлбасыбеткі қабатта оксид пленкасының таяз қабаты пайда болатындығын, көміртекпен қаныққан мартенситті қатайтылған қабат бастапқы перлит-феррит құрылымына біртіндеп ауысатындығын көрсетеді.

3. 20х болат үлгісінің беттік қаттылығының ЭПМ кейін бастапқы күйіне қатысты 2 есе жоғарылауы анықталды.

Алғыс

Мақала ЖТН АР09058518 «Машина жасау саласында электролитті-плазмалық модификациялаумен материалдардың тозуға төзімділігін арттыру» гранттық жобаны жүзеге асыру аясында «ҚР БҒМ Ғылым комитеті» қаржылық қолдауымен жазылды.

Әдебиеттер

1 Бондарев А.А., Тюрин Ю.Н., Погребняк А.Д., Колисниченко О.В., Дуда И.М. Влияние обработки импульсной плазмой и электронным пучком поверхности износостойких покрытий на основе Ni на их функциональные свойства // Упрочняющие технологии и покрытия. – 2012. – № 4. – С. 16-20.

2 Doudkin M., Kombayev K., Kim A.I., Azamatov B., Azamatova Zh. Research of cutting temperature reducing of titanium alloy grade 5 below polymorphic transformation depending on calculation of cutting modes //International Journal of Mechanical and Production Engineering Research and Development (IJMPERD). – 2020. – Vol. 10, Iss.2. – P. 747–758.

3 Геллер Ю.А., А.Г. Рахштат. Материаловедение. – Изд. 6-е, перераб. и доп. – М.: «Металлургия», 1989. – 456 с.

4 Погребняк А.Д., Кульментьева О.П. и др. Процессы массопереноса и легирования при электролитно-плазменной обработке чугуна // Письма в ЖТФ. – 2003. – Т. 29, вып. 8. – С. 2-6.

5 Kombayev K.K., Doudkin M.V., Kim A.I., Mlynczak M., Rakhadilov B.K. Surface hardening of the aluminum alloys Al3 by electrolytic-plasma treatment //News Of the national academy of sciences of the republic of Kazakhstan. Series of geology and technical sciences. – 2019. – Vol. 4, No 436. – P. 222 – 229.

6 Способ электролитно-плазменного упрочнения деталей бурового долота: пат. 23178 РК: МПК C21D1/78 (2009.01), C21D 1/34 (2009.01).

7 Rakhadilov B.K., Sagdoldina Zh.B., Ocheredko I.A., Kombaev K.K. Khassenov A.K. Impact research of electron beam processing on the structure and properties of PA6 polyamide //Eurasian Physical Technical Journal, Materials science. – 2019. – Vol.16, №2 (32). – P.43-47.

8 Kozha E., Smagulov D.U., Akhmetova G.E., Kombaev K.K. Laboratory installation for electrolytic-plasma treatment of steel //NEWS of national academy of sciences of the republic of Kazakhstan. –2017. – Vol. 4(424). – P. 219-225.

9 Jiang Y.F., Bao Y.F., Yang K. Effect of C/N concentration fluctuation on formation of plasma electrolytic carbonitriding coating on Q235 //Journal of Iron Steel Research. – 2012. – Vol. 19, No 11. – P. 39-45.

10 Wu J., Xue W., Wang B. et al. Characterization of carburized layer on T8 steel fabricated by cathodic plasma electrolysis // Surface and Coatings Technology. - 2014. - Vol. 245. - P. 9-15.

11 Wang B., Xue W.B., Wu J., Jin X.Y. and Hua M.Characterization of surface hardened layers on Q235 low-carbon steel treated by plasma electrolytic borocarburizing //Journal of Alloys and Compounds. – 2013. – No 578. – P. 162-169.

12 Тюрин Ю.Н., Погребняк А.Д. Особенности электролитно-плазменной закалки (ЭПЗ) //Журнал технической физики. – 2002. – Т. 72, вып. 11. – С. 119-120.

13 Alavi S.H., Dehghanian C., Taheri P. Investigation of corrosion behaviour of carbon steel coated by pulsed plasma electrolytic boronising technique in 35 wt-% NaCl aqueous solution //Surface engineering. – 2011. – No 27. – P. 509-514.

14 Wang B., Jin X.Y., Xue W.B., Wu Z.L., Du J.C., Wu J. High temperature tribological behaviors of plasma electrolytic borocarburized Q235 low-carbon steel //Surface and Coatings Technology. – 2013. – No 232. – P. 142-149.

15 Wu J., Xue W., Jin X. et al. Preparation and characterization of diamond-like carbon/oxides composite film on carbon steel by cathodic plasma electrolysis // Applied Physics Letters. – 2013. – Vol. 103. – P. 031905.

16 Jiang Y.F., Bao Y.F., Yang K. Effect of C/N concentration fluctuation on formation of plasma electrolytic carbonitriding coating on Q235 // Journal of Iron Steel Research. – 2012. – Vol. 19. – No 11. – P. 39-45.

17 Jiang Y.F., Geng T., Bao Y.F., Zhu Y. Electrolyte-electrode interface and surface characterization of plasma electrolytic nitrocarburizing //Surface and Coatings Technology. – 2013. – Vol. 216. – P. 232-236.

18 Kong J.H., Takeda T., Okumiya M. et al. The Study about Surface Modification of Steel by Water Plasma //13th Intern. Conf. on Plasma Surface Engineering, September 10-14 in Garmisch-Partenkirchen, Germany. – 2012. – P. 157-160.

19 Скаков М.К., Курбанбеков Ш.Р. Исследование коррозионной стойкости и фазового состава поверхностных слоев стали 12Х18Н10Т после плазменной нитроцементации и азотирования //Вестник Казахстанского национального технического университета. – 2013. – № 4.

20 Скаков М.К., Рахадилов Б.К. Влияние электролитно-плазменной обработки на структуру, фазовый состав и микротвердость стали P6M5 //Вестник Казахстанского национального технического университета. – 2012. – № 3.

21 Скаков М.К., Рахадилов Б.К., Батырбеков Э.Г. и др. Влияние режимов электролитно-плазменного азотирования на структурно-фазовое состояние и износостойкость стали Р6М5 //Вестник Казахстанского национального технического университета. – 2014. – № 3.

22 Zarchi M.K., Shariat M.H., Dehghan S.A., Solhjoo S. Characterization of nitrocarburized surface layer on AISI 1020 steel by electrolytic plasma processing in an urea electrolyte //Journal of Materials Research and Technology. – 2013. – Vol. 2. – No 3. – P. 213-220.

23 Jiang Y.F., Bao Y.F., Yang K. Effect of C/N concentration fluctuation on formation of plasma electrolytic carbonitriding coating on Q235 // Journal of Iron Steel Research. – 2012. – Vol. 19. – No 11. – P. 39-45.

24 Rastkar A.R., Shokri B. Surface modification and wear test of carbon steel by plasma electrolytic nitrocarburizing //Surface and Interface Analysis. – 2012. – No 44. – P. 342-351.

25 Tavakoli H., Mousavi Khoie S.M., Marashi S.P., Bolhasani O. Effect of Electrolyte Composition on Characteristics of Plasma Electrolysis Nitrocarburizing //Journal of Materials Engineering and Performance. – 2013. – Vol. 22. – No 8. – P. 2351-2358.

26 Tavakoli H., Mousavi Khoie S.M., Marashi S.P.H., Hosseini S.A. Mogadam Characterization of submicron-size layer produced by pulsed bipolar plasma electrolytic carbonitriding //Journal of Alloys and Compounds. – 2014. – No 583. – P. 382-389.

27 Pang H., Zhang G.-L., Wang X.Q., Lv G.-H., Chen H., Yang S.-Z. Mechanical Performances of Carbonitriding Films on Cast Iron by Plasma Electrolytic Carbonitriding //Chinese Physics Letters. – 2011. – Vol. 28. – No 11. – Art.No 118103.

28 Mahzoon F., Behgozin S.A., Bahrololoom M.E., Javadpour S. Study the fatigue-wear behavior of a plasma electrolytic nitrocarburized (PEN/C) 316L stainless steel //Journal of Materials Engineering and Performance. – 2012. – Vol. 21. – No 8. – P. 1751-1756.

29 Kumruoglu L.Cenk, Yerokhin A., Ozel A., Matthews A. Effect of nitrogen gas addition onto the process of plasma electrolytic nitrocarburising of AISI 316L stainless steel //Proceed. 1st ISTS International Surface Treatment Symposium, Istanbul. – 2011. – P. 295-310.

30 Lin N., Xie R., Zhou P., Ma Y., Wang Z., Han P., Wang Z., Tang B. Review on improving wear and corrosion resistance of steel via plasma electrolytic saturation //Surface Review and Letters. – 2016. – Vol. 23. – No 4. – Art.No 1630002.

References

1 A.A. Bondarev, Yu.N.Tyurin, A.D.Pogrebnyak, O.V. Kolisnichenko and I.M. Duda, Uprochnyayushchiye tekhnologii i pokrytiya, 4, 16-20 (2012). (in Russ).

2 M.B. Doudkin, K.K. Kombayev, A.I. Kim, B.N. Azamatov and Zh.Zh. Azamatova, IJMPERD, 10, 747–758 (2020).

3 Yu.A. Geller and A.G. Rakhshtat, Materials Science, 456 (1989). (in Russ).

4 D. Pogrebnyak and O. P. Kulmenteva, Technical Physics Letters, 8, 2-6 (2003). (in Russ).

5 K.K. Kombayev, M.V. Doudkin, A.I. Kim, M. Mlynczak and B.K. Rakhadilov, News Of the national academy of sciences of the republic of Kazakhstan, 4(436), 222 – 229 (2019)

6 Method of electrolyte-plasma hardening of drill bit parts: pat. 23178 RK: IPC C21D1 / 78 (2009.01), C21D 1/34 (2009.01). (in Russ).

7 B.K. Rakhadilov, Zh.B. Sagdoldina, I.A. Ocheredko, K.K. Kombaev and A.K. Khassenov, Eurasian Physical Technical Journal, (32),43-47(2019).

8 E. Kozha, D.U. Smagulov, G.E. Akhmetova and K.K. Kombaev, News of national academy of sciences of the republic of Kazakhstan, 4(424), 219-225 (2017).

9 Y.F. Jiang, Y.F. Bao and K. Yang, Journal of Iron Steel Research, 11, 39-45 (2012).

10 J. Wu, W. Xue and B. Wang, Journal of Alloys and Compounds, 245, 9-15 (2014).

11 B. Wang, W.B. Xue, J. Wu, X.Y. Jin and M. Hua, Journal of Alloys and Compounds, 578, 162-169 (2013).

12 Yu.N. Tyurin and A.D. Pogrebnyak, Journal of Technical Physics, 72 (11), 119-120 (2002). (in Russ).

13 S.H. Alavi, C. Dehghanian and P. Taheri, Surface engineering, 27, 509-514 (2011).

14 B. Wang, X.Y. Jin, W.B. Xue, Z.L. Wu, J.C. Du and J. Wu High, Surface and Coatings Technology, 232, 142-149 (2013).

15 J. Wu, W. Xue, X. Jin, Applied Physics Letters, 103, 031905 (2013).

16 Y.F. Jiang, Y.F. Bao, K. Yang, Journal of Iron Steel Research, 19(11)39-45(2012)

17 Y.F. Jiang, T. Geng, Y.F. Bao and Y. Zhu, Surface and Coatings Technology, 216, 232-236 (2013).

18 J.H. Kong, T. Takeda and M. Okumiya, *13th International Conference on Plasma Surface Engineering*, Germany, 157-160 (2012).

19 M.K. Skakov and Sh.R. Kurbanbekov, Bulletin of the Kazakhstan National Technical University, 4 (2013). (in Russ).

20 M.K. Skakov and B.K. Rakhadilov, Bulletin of the Kazakhstan National Technical University, 3 (2012). (in Russ).

21 M.K. Skakov, B.K. Rakhadilov and E.G. Batyrbekov, Bulletin of the Kazakhstan National Technical University, 3 (2014). (in Russ).

22 M.K. Zarchi, M.H. Shariat, S.A. Dehghan and S. Solhjoo, Journal of Materials Research and Technology, 3, 213-22 0(2013).

23 Y.F. Jiang, Y.F. Bao and K. Yang, Journal of Iron Steel Research, 19, (11), 39-45 (2012).

24 A.R. Rastkar and B. Shokri, Surface and Interface Analysis, 44, 342-351 (2012).

25 H. Tavakoli, S.M. Mousavi Khoie, S.P. Marashi, O. Bolhasani, Journal of Materials Engineering and Performance, 22(8), 2351-2358 (2013).

26 H. Tavakoli, S.M. Mousavi Khoie, S.P.H. Marashi and S.A. Hosseini Mogadam, Journal of Alloys and Compounds, 583, 382-389 (2014).

27 H. Pang, G.-L. Zhang, X.Q. Wang, G.-H. Lv and H. Chen, S.-Z, Chinese Physics Letters, 28 (11), 103-118 (2011).

28 F. Mahzoon, S.A. Behgozin, M.E. Bahrololoom and S. Javadpour, Journal of Materials Engineering and Performance, 21 (8), 1751-1756 (2012).

29 L. Cenk Kumruoglu, A. Yerokhin, A. Ozel and A. Matthews, 1st ISTS International Surface Treatment Symposium, Istanbul, 295-310 (2011).

30 N. Lin, R. Xie, P. Zhou, Y. Ma, Z. Wang, P. Han, Z, Surface Review and Letters, 23 (4), 163-200 (2016).

МРНТИ 29.05.29

https://doi.org/10.26577/RCPh.2021.v78.i3.09



Satbayev University, Физико-технический институт, Казахстан, г. Алматы Институт ядерной физики, Казахстан, г. Алматы *e-mail: ananastasia@list.ru

ОСОБЕННОСТИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ СОБЫТИЙ ПО МНОЖЕСТВЕННОСТИ ВТОРИЧНЫХ ЧАСТИЦ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ЭНЕРГИИ СТОЛКНОВЕНИЯ И АССИМЕТРИЧНОСТИ СТАЛКИВАЮЩИХСЯ РЕЛЯТИВИСТСКИХ ЯДЕР

Для поиска сигналов фазового перехода вещества из адронного состояния в кваркглюонную плазму исследуются взаимодействия с экстремальными характеристиками. Проведено исследование зависимости средней множественности от энергии налетающего ядра для ядер серы и кремния с энергиями 3.7 АГэВ, 14 АГэВ и 200 АГэВ. Экспериментальные данные неупругих взаимодействий с ядрами эмульсии NIKFI BR-2 получены на SPS в CERN и на Синхрофазотроне в ОИЯИ. Для учета флуктуаций начальных условий ядро-ядерного взаимодействия события были разделены на центральные и периферические. Приведен сравнительный анализ средней множественности с тяжелыми и легкими ядрами фотоэмульсии. Коэффициент увеличения множественности имеет почти прямолинейный рост от энергии (на логарифмической оси) для всех событий, за исключением центральных взаимодействий ядер серы с тяжелыми ядрами фотоэмульсии при 200 АГэВ. Данные события являются событиями взрывного типа, которые дают поток вторичных частиц в узком интервале средней псевдобыстроты и существенно смещенным в сторону низких значений $<\eta>$. Представлен анализ событий полного разрушения ядра снаряда. Такие события рассматриваются как события, в которых созданы наиболее благоприятные условия для образования кварк-глюонной плазмы.

Ключевые слова: множественность вторичных частиц, псевдобыстротные распределения, ядерные эмульсии, неупругие взаимодействия ядер.

A.I. Fedosimova *, I.A. Lebedev, E.A. Dmitriyeva, S.A. Ibraimova, E.A. Bondar, P.M. Krassovitskiy Satbayev University, Institute of Physics and Technology, Kazakhstan, Almaty Institute of Nuclear Physics, Kazakhstan, Almaty *e-mail: ananastasia@list.ru

Features of the distribution of events by the multiple of secondary particles depending on the energy of collision and the assymetricity of collising relativistic nuclei

To search for signals of the phase transition of matter from the hadronic state to the quark-gluon plasma, interactions with extreme characteristics are studied. The study of the dependence of the average multiplicity on the projectile energy for sulfur and silicon nuclei with energies of 3.7 AGeV, 14 AGeV, and 200 AGeV has been carried out. Experimental data on inelastic interactions with the nuclei of the NIKFI BR-2 emulsion obtained at the SPS at CERN and at the Synchrophasotron at JINR. To take into account fluctuations in the initial conditions of the nucleus-nucleus interaction, the events were divided into central and peripheral ones. A comparative analysis of the average multiplicity with heavy and light nuclei of the photographic emulsion is presented. The multiplicity increase factor has an almost linear increase in energy (on the logarithmic axis) for all events, except for the central interactions of sulfur nuclei with heavy emulsion nuclei at 200 AGeV. These events are explosive events, which give a flux of secondary particles in a narrow range of average pseudo-rapidity and significantly shifted towards low values $< \eta >$. The analysis of events of complete destruction of the projectile nucleus is presented. Such events are considered as events in which the most favorable conditions are created for the formation of a quark-gluon plasma.

Key words: multiplicity of secondary particles, pseudo-rapidity distributions, nuclear emulsions, inelastic interactions of nuclei.

А.И. Федосимова*, И.А. Лебедев, Е.А. Дмитриева, С.А. Ибраимова, Е.А. Бондарь, П.М. Красовицкий Satbayev University, Физика-техникалық институты, Қазақстан, Алматы қ. Ядролық физика институты, Қазақстан, Алматы қ. *e-mail: ananastasia@list.ru

Соқтығысу энергиясына және соқтығысатын релятивистік ядролардың асимметриясына байланысты қайталама бөлшектердің көптігі бойынша оқиғалардың таралу ерекшеліктері

Заттың адрондық күйден кварк-глюон плазмасына фазалық ауысу сигналдарын іздеу үшін экстремалды сипаттамалармен өзара әрекеттесу зерттеледі. 3.7 АГэВ, 14 АГэВ және 200 АГэВ энергиялары бар күкірт және кремний ядролары үшін ұшатын ядро энергиясына орташа көптіктің тәуелділігін зерттеу жүргізілді. NIKFI BR-2 эмульсиясының ядроларымен өзара әрекеттесудің эксперименттік деректері CERN-де SPS-те және ОИЯИ-де Синхрофазотронда алынды. Ядроядролық өзара әрекеттесудің бастапқы жағдайларының ауытқуын есепке алу үшін оқиғалар орталық және перифериялық болып бөлінді. Фотоэмульсияның ауыр және жеңіл ядроларымен орташа көпшенің салыстырмалы талдауы келтірілген. Көбейту коэффициенті 200 АГэВ ауыр фотоэмульсия ядроларымен күкірт ядроларының орталық өзара әрекеттесуін қоспағанда, барлық оқиғалар үшін энергиядан (логарифмдік өсте) тікелей өсуге ие. Бұл оқиғалар – орташа псевдобыстроттың тар интервалында екінші реттік бөлшектердің ағынын беретін және <*η*> төмен мәндеріне айтарлықтай ауысатын жарылғыш типтегі оқиғалар. Снаряд ядросының толық бұзылу оқиғаларына талдау ұсынылған. Мұндай оқиғалар кварк-глюон плазмасының пайда болуы үшін ең қолайлы жағдайлар жасалған оқиғалар ретінде қарастырылады.

Түйін сөздер: қайталама бөлшектердің көптігі, псевдобыстротты үлестірімдер, ядролық эмульсиялар, ядролардың серпімді емес өзара әрекеттесуі.

Введение

Изучение свойств фазового перехода вещества из адронного состояния в кварк-глюонную плазму [1-3] является актуальной задачей для современной физики [4-6]. Для поиска сигналов фазового перехода исследуют взаимодействия с экстремальными характеристиками [7]. При ядро-ядерных взаимодействиях высоких энергий [8-11] образуется большое количество частиц, и множественность таких событий чрезвычайно важна для детального исследования характеристик процесса образования новых частиц [12,13]. Предполагается, что события полного разрушения ядра снаряда, в которых создаются благоприятные условия для образования кварк-глюонной плазмы, представляют собой центральные взаимодействия, в которых передается максимальная энергия налетающего ядра в область взаимодействия [14,15]. Для исследования особенностей распределения событий по множественности вторичных частиц [16,17] в зависимости от энергии столкновения были проанализированы события взаимодействия налетающего ядра с неподвижной мишенью[18].

Методика исследования

В качестве мишени использовалась легкие (CNO) и тяжелые (AgBr) ядра фотоэмульсии [19]. Эмульсионный метод является крайне информативным для изучения точки фазового перехода [20-23]. Были использованы следующие экспериментальные данные: 837 неупругих взаимодействий S+Em 200 АГэВ [24-26] с ядрами эмульсии NIKFIBR-2, полученные на SPS в CERN и 924 неупругих взаимодействия S+Em3.7 АГэВ с ядрами эмульсии NIKFIBR-2, полученные на Синхрофазотроне в ОИЯИ (Дубна, Россия) [27,28].

Результаты и обсуждение

Для понимания возможной связи особенностей множественного рождения и параметров фрагментации налетающего ядра были проанализированы распределения по множественности в зависимости от энергии взаимодействия [29,30].

На рисунке 1 представлены распределения по множественности ливневых частиц n_s в центральных событиях с полным разрушением на-

летающего ядра ($N_f=0$) и событиях с одним многозарядным фрагментом во взаимодействиях $S+Em200 \ A\Gamma$ эB.

Как видно из рисунка 1 кроме ожидаемого роста множественности при высоких энергиях в событиях центрального типа с $N_f = 0$ появляется дополнительная составляющая. Распределение

событий по множественности представляет собой ясную двухгорбовую структуру, разделенную уровнем $n_s=200$. При этом вероятность событий высокой множественности (например, с $n_s=400$) практически совпадает с вероятностью появления событий малой множественности (например, с $n_s=40$).



Рисунок 1 – Множественность n_s частиц для взаимодействий S+Em 200 A ГэВ с разным числом многозарядных фрагментов N_r

Для исследования других отличительных особенностей таких событий проанализировано их среднее псевдобыстротное распределение [31], представленное на рисунке 2.

Для сравнения на всех рисунках 2 а), б), в) и г) наложен фит функцией Гаусса для полного распределения по средней псевдобыстроте ливневых частиц, нормированный на число событий, представленных на рисунке 2. Как видно из рисунка 2, распределение по средней псевдобыстроте ливневых частиц в событиях с $N_{f}=0$ и множественностью $n_{s}>200$ существенно отличается от других распределений, представленных на этом рисунке. Во- первых, это распределение значительно более узкое, чем другие распределения. Дисперсия распределения, представленного на рисунке 2 г), в 2.3 раза меньше дисперсии распределения, представленного на рисунке 2 в). Во-вторых, среднее значение распределения, представленного на

рисунке 2 г), существенно смещено в сторону низких значений < η>.

Таким образом, в столкновениях *S*+*Em* при энергии 200 АГэВ с ядрами фотоэмульсии обнаружены события взрывного типа с высокой

множественностью, которые дают поток вторичных частиц в узком интервале средней псевдобыстроты и существенно смещенным в сторону низких значений $<\eta>$ (смещение в сторону больших углов).



Рисунок 2 – Распределение по средней псевдобыстроте событий взаимодействия ядер серы S с энергией 200 АГэВ с ядрами фотоэмульсии для событий с разным числом многозарядных фрагментов N_e

Для исследования зависимости средней множественности от энергии налетающего ядра на рисунке 3 построены распределения для серы и кремния с энергиями 3.7 АГэВ, 14 АГэВ и 200 АГэВ. Для учета флуктуаций начальных условий ядро-ядерного взаимодействия события были разделены на центральные и периферические.

Как центральные взаимодействия рассматривались события, в которых отсутствуют многозарядные фрагменты ($N_f=0$), как периферические взаимодействия рассматривались события с одним многозарядным фрагментом налетающего ядра ($N_f=1$).

Из рисунка 3 видно, что с ростом энергии увеличивается средняя множественность вторичных частиц. Однако при больших энергиях *S*+*Em* 200 АГэВ рост множественности вторичных частиц для центральных взаимодействий намного больше, чем в событиях с периферическим взаимодействием ядер, что указывает на аномальный рост числа событий полного разрушения ядра-снаряда. Для взаимодействий серы с энергией 3.7 АГэВ и для ядер кремния с энергией 14 АГэВ и для периферических и для центральных взаимодействий множественность ливневых частиц отличается примерно в 2 раза.



Рисунок 3 – Зависимость средней множественности вторичных частиц n_s во взаимодействиях S+Em 3.7 АГэВ, Si+Em 14 АГэВ и S+Em 200 АГэВ от энергии взаимодействия для событий полного разрушения налетающего ядра (N_c=0) и событий с одним многозарядным фрагментом

Для взаимодействий S+Em 200 АГэВ коэффициент увеличения множественности зависит от степени перекрытия ядер, для центральных взаимодействий C_m =8.4, а для периферических C_m =4.8.

Для понимания возможной связи асимметрии взаимодействующих ядер и особенностей аномально высокой множественности ливневых частиц на рисунке 5 представлена зависимость средней множественности вторичных частиц n во взаимодействиях S+Em3.7 АГэВ, Si+Em 14 АГэВ и S+Em 200 АГэВ от энергии взаимодействия для событий с различным числом фрагментов ядра мишени $N_{\scriptscriptstyle h}$ и многозарядных фрагментов ядра снаряда $N_{\scriptstyle r}$

При сравнительном анализе средней множественности для взаимодействий ядер серы и кремния с тяжелыми и легкими ядрами фотоэмульсии, представленном на рисунке 4, обнаружена зависимость коэффициента увеличениямножественности события от размера ядра-мишени. Коэффициент увеличения множественности C_m имеет почти прямолинейный рост от энергии (на логарифмической оси) для всех событий, за исключением центральных взаимодействий ядер серы с тяжелыми ядрами фотоэмульсии при 200 АГэВ.



Черные круги – $N_f=0$, $N_h>8$; зеленые треугольники – $N_f=0$, $N_h>8$; красные квадраты - $N_f=1$, $N_h\leq8$; синие звезды – $N_f=1$, $N_h\leq8$



Таким образом, множественность события существенно зависит от энергии взаимодействия и асимметрии ядро-ядерного взаимодействия.

Заключение

С ростом энергии увеличивается средняя множественность вторичных частиц. Однако при больших энергиях *S+Em* 200 АГэВ рост множественности вторичных частиц для центральных взаимодействий намного больше, чем в событиях с периферическим взаимодействием ядер, что указывает на аномальный рост числа событий полного разрушения ядраснаряда.

Распределение по средней псевдобыстротетаких событий существенно смещено в сторону низких значений $\langle \eta \rangle$, что свидетельствует о двух различных потоках частиц, направленных под различными углами.

Благодарность

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства Образования и Науки Республики Казахстан (грант № АР08855403, грант № АР09562078, грант № ВR10965191).

Литература

1 Scharenberg R.P., Srivastava B.K., Hirsch A.S., Pajares C. Hot Dense matter: deconfinement and clustering of color sources in nuclear collisions // Universe. – 2018. – Vol. 4(9). – 96.

² Sahu D., Tripathy S., Pradhan G.S., Sahoo R.Role of event multiplicity on hadronic phase lifetime and QCD phase boundary in ultrarelativistic collisions at energies available at the BNL Relativistic Heavy Ion Collider and CERN Large Hadron Collider // Physical Review C. -2020. - Vol. 101(1). - ID.014902.

3 Bernhard J.E., Moreland J.S., Bass S.A. Characterization of the initial state and QGP medium from a combined Bayesian analysis of LHC data at 2.76 and 5.02 TeV // Nuclear physics A. – 2017. – Vol.967. – P.293-296.

4 A.M. Syam Kumar, J.P.Prasanth, Vishnu M.Bannur Quark-gluon plasma phase transition using cluster expansion method // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. – 2015. – Vol. 432. – P. 71-75.

5 Zhang X.B., Zhang Q.R. Zero-density phase transition to quark-gluon plasma and the relativistic finite baryon volume effect in hadronic matter //Communications in Theoretical physics. – 1999. – Vol. 32(4). – P. 575-582.

6 Ropke G. The physics of quark-gluon plasma and relativistic charged particle systems // Contributions to Plasma Physics. – 2003. – Vol. 43(5-6). – P. 350-354.

7 Alice Ohlson Investigating correlated fluctuations of conserved charges with net-A fluctuations in Pb–Pb collisions at ALICE //XXVIIth International Conference on Ultrarelativistic Nucleus-Nucleus Collisions (Quark Matter 2018). // Nuclear Physics A. – 2019. – Vol. 982. – P. 299–302.

8 Bhattacharyya S., Haiduc M., Neagu A.T., Firu E. An investigation of projectile helium fragments in high-energy nucleusnucleus interactions //Canadian Journal of Physics. – 2020. – Vol. 98(2). – P. 153-157.

9 Abdurakhmanov U., Gulamov K., Lugovoi V., Navotny V. Observation of gaussian pseudorapidity distributions for produced particles in proton-nucleus collisions at tevatron energies //Advances in High Energy Physics. – 2018. – Vol.2018. – ID.3098252.

10 Bhattacharyya S. Studies of asymmetric particle production in different multiplicity zones in azimuthal space in high energy nucleus-nucleus interactions //Canadian Journal of Physics. – 2021. – Vol. 99(5). – P. 340-346.

11 Rasool M.H., Ahmad S. Some observations on Levy stability and intermittency in nucleus-nucleus interactions at SPS energies //Chinese Journal of Physics. – 2017. – Vol.55(2). – P.260-267.

12 Bhattacharyya S., Haiduc M., Neagu A.T., Firu E. Event by event analysis of maximum pseudo-rapidity gap fluctuation in high energy nucleus-nucleus collisions // EPL. – 2019. – Vol. 126. – 42001.

13 Bhattacharyya S., Haiduc M., Neagu A.T., Firu E. An investigation of projectile helium fragments in high energy nucleusnucleus interactions // Canadian J. of Phys. - 2020. - Vol. 98(2). - P.153-157.

14 Kawecka A. Collective dynamics in relativistic nuclear collisions studied with ALICE at the LHC// Photonics applications in Astronomy, Communications, Industry, and High Energy Physics Experiments. – 2020. – Vol.11581. – ID.1158113.

15 Bhattacharyya S. Centrality dependence of pseudo-rapidity distribution in nucleus-nucleus collisions at (4.1-4.5) AGeV/c // International journal of modern physics E. – 2020. – Vol.29 (4). – ID.2050020.

16 Basu S., Thakur S., Nayak T.K., Pruneau C.A. Multiplicity and pseudo-rapidity density distributions of charged particles produced in pp, pA and AA collisions at RHIC & LHC energies //Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics. – 2021. – Vol.48(2). – ID.025103.

17 Kawaguchi K., Murase K., Hirano T. Multiplicity fluctuations and collective flow in small colliding systems // Nuclear Physics A. – 2017. – Vol. 967. – P. 357-360.

18 Andreeva N.P., Gaitinov A.Sh., Lebedev I.A., Skorobogatova V.I., Filippova L.N., Shaikhieva D.B. Full destruction characteristics of light and heavy nuclei with 3.7–158 AGeV energies //Physics of Elementary Particles and Atomic Nucleus. Experiment. – 2007. – Vol.4(1). – P.67-72.

 $19\,Kumar\,S., Singh\,M.K., Singh\,V., Jain R.K. \ Characteristics of the grey particles emission at relativistic energy // The European Physical Journal Plus. - 2021. - Vol. 136. - N.115.$

20 Zhi Zhang, Tian-Li Ma, Dong-Hai Zhang Forward–backward emission of target evaporated fragments in high energy nucleus–nucleus collisions //Physics Procedia. – 2015. – Vol. 80. – P.50-53.

21 Bari W., Rather N.A. Sensitivity of multiplicity fluctuations to rapidity in high-energy nucleus-nucleus interactions //Ukrainian Journal of Physics. – 2017. –Vol.62(1). – P.12-19.

22 Bhoumik G., Bhattacharyya S., Deb A., Ghosh D. Measurements of charged hadron fluctuations in pseudo-rapidity bins in O-16-AgBr at 60 A GeV and S-32-AgBr at 200 AGeV //European Physical Journal A. – 2015. –Vol.51(7). – N.78.

23 Ghosh D., Deb A., Bhattacharyya S., Datta U. Multiplicity dependence of entropy in different rapidity bins in high-energy nucleus-nucleus interactions //Physica Scripta. - 2012. -Vol.85(6). - ID.065205.

24 Gaitinov A. Sh., Kharchevnikov P.B., Lebedev I.A., Lebedeva A.I. Investigation of density structure of pseudorapidity fluctuations in interactions of nuclei Au 10.7 AGeV and Pb 158 AGeV with photoemulsion nuclei by Hurst method //HEP-Ph. –2012. –Vol.1 – P.1-10.

25 Fedosimova A.I., Gaitinov A. Sh., Grushevskaya E., Lebedev I. Study of the peculiarities of multiparticle production via event-by-event analysis in asymmetric nucleus-nucleus interactions// EPJ Web of Conferences. – 2017. – Vol.145. – ID.19009.

26 Lebedev I.A., Temiraliev A.T., Fedosimova A.I. Initial state fluctuations and complete destruction of the projectile nucleus in interactions of asymmetric nuclei at high energies //Knowledge E Energy & Physics. – 2018. – P.102–108.

27 Adamovich M.I. et al. Azimuthal correlation of secondary particles in ³²S induced interactions with Ag(Br) nuclei at 4.5 GeV/c/nucleon // Part.Nucl.Lett. – 2000. – Vol.4(101). – P.75-82.

28 Adamovich M.I. et al. Rapidity densities and their fluctuations in central 200 AGeV 32S interactions with Au and Ag, Br nuclei EMU01 collaboration //Phys. Lett. B. – 1989. –Vol. 227. – P.285-290.

29 Fedosimova A.I., Gaitinov A.Sh., Lebedev I.A., Temiraliev A.T. Study on initial geometry fluctuations via correlation of finite distributions of secondary particles in nucleus-nucleus interactions //J. Phys.: Conf. Ser. – 2016. – Vol.668. – ID.012067.

30 Andronov E. Transverse momentum and multiplicity fluctuations in Ar+Sc collisions at the CERN SPS from NA61/SHINE //Acta Physica Polonica B Proceedings Supplement. – 2017. –Vol. 10(3). – P.449-453.

31 Ying Yuan Cylinder models and particle (pseudo)rapidity distributions in nucleus-nucleus collisions at high energies //Radiation measurements. - 2008. - Vol.43. - P.250-253.

References

1 R.P. Scharenberg, B.K. Srivastava, A.S. Hirsch and C. Pajares, Universe 4, 96 (2018).

2 D. Sahu, S. Tripathy, G.S. Pradhan and R. Sahoo, Physical review C 101, ID.014902 (2020).

3 J.E. Bernhard., J.S. Moreland and Bass S.A., Nuclear physics A 967, 293-296 (2017).

4 A.M. Syam Kumar, J.P.Prasanth and Vishnu M.Bannur, Physica A: Statistical Mechanics and its Applications **432**, 71-75 (2015).

5 X.B. Zhang and Q.R. Zhang, Communications in Theoretical physics 32, 575-582, (1999).

6 G. Ropke, Contributions to Plasma Physics 43, 350-354 (2003).

7 Alice Ohlson, XXVIIth International Conference on Ultrarelativistic Nucleus-Nucleus Collisions (Quark Matter 2018), Nuclear Physics A 982, 299–302 (2019).

8 S. Bhattacharyya, M. Haiduc, A.T. Neagu and E. Firu, Canadian Journal of Physics 98, 153-157 (2020)..

9 U. Abdurakhmanov U., K. Gulamov, V. Lugovoi and V. Navotny, Advances in High Energy Physics **2018**, ID.3098252 (2018).

10 S. Bhattacharyya, Canadian Journal of Physics 99, 340-346 (2021).

11 M.H. Rasool M.H. and S. Ahmad, Chinese Journal of Physics 55, 260-267 (2017).

12 S. Bhattacharyya, M. Haiduc, A.T. Neagu and E. Firu, EPL 126, ID.42001 (2019).

13 S. Bhattacharyya, M. Haiduc, A.T. Neagu and E.Firu, Canadian J. of Phys. 98, 153-157 (2020).

14 A. Kawecka, Photonics applications in Astronomy, Communications, Industry, and High Energy Physics Experiments **11581**, ID.1158113 (2020).

15 S. Bhattacharyya, International journal of modern physics E 29, ID.2050020 (2020).

16 S. Basu, S. Thakur, T.K. Nayak and C.A. Pruneau, Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics 48, ID.025103 (2021).

17 K. Kawaguchi, K. Murase and T. Hirano, Nuclear Physics A 967, 357-360 (2017).

18 N.P. Andreeva, A.Sh. Gaitinov, I.A. Lebedev, V.I. Skorobogatova, L.N. Filippova and D.B. Shaikhieva, Physics of Elementary Particles and Atomic Nucleus. Experiment **4**, 67-72 (2007).

19 S. Kumar, M.K. Singh, V. Singh and R.K. Jain, The European Physical Journal Plus 136, 115(2021).

20 Zhi Zhang, Tian-Li Ma and Dong-Hai Zhang, Physics Procedia 80, 50-53(2015).

21 W. Bari and N.A. Rather, Ukrainian Journal of Physics 62, 12-19 (2017).

22 G. Bhoumik, S. Bhattacharyya, A. Deb and D. Ghosh, European Physical Journal A 51, N.78 (2015).

23 D. Ghosh, A. Deb, S. Bhattacharyya and U. Datta, Physica Scripta 85, ID.065205 (2012).

24 A. Sh. Gaitinov, P.B. Kharchevnikov, I.A. Lebedev and A.I. Lebedeva, HEP-Ph. 1, 1-10, (2012).

25 A.I. Fedosimova, A. Sh. Gaitinov, E. Grushevskaya and I. Lebedev, EPJ Web of Conferences 145, ID.19009 (2017).

26 I.A. Lebedev, A.T. Temiraliev and A.I. Fedosimova, Knowledge E Energy & Physics 3, 102-108 (2018).

27 M.I. Adamovich et al., Part.Nucl.Lett. 4(101), 75-82, (2000).

28 M.I. Adamovich et al., Phys. Lett. B. 227, 285-290, (1989).

29 A.I. Fedosimova, A.Sh. Gaitinov, I.A. Lebedev and A.T Temiraliev, J. Phys.: Conf. Ser. 668, ID 012067 (2016).

30 E. Andronov, Acta Physica Polonica B Proceedings Supplement 10(3), 449-453 (2017).

31 Ying Yuan, Radiation measurements 43, 250-253 (2008).

4-бөлім БЕЙСЫЗЫҚ ФИЗИКА. РАДИОФИЗИЗИКА

Section 4

NONLINEAR PHYSICS. RADIOPHYSICS

Раздел 4 НЕЛИНЕЙНАЯ ФИЗИКА. РАДИОФИЗИКА

МРНТИ 47.45.29



Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Казахстан, г. Алматы *e-mail: beibitkaribaev7@gmail.com

S- И Х-ДИАПАЗОННАЯ ПАТЧ-АНТЕННА ДЛЯ НАНОСПУТНИКОВ CUBESAT

Концепция CubeSat стала очень популярной как в университетских группах, так и среди исследователей, космических агентств, правительств и компаний. CubeSat предлагает быстрый и доступный способ для широкого круга заинтересованных сторон быть активным в космосе. Благодаря высокой степени модульности и широкому использованию готовых коммерческих подсистем проекты CubeSat могут быть подготовлены к полёту гораздо быстрее, чем при использовании традиционных спутниковых расписаний, обычно в течение одного-двух лет. В данной работе нами рассмотрена модель патч-антенны S и X диапазонов для наноспутников CubeSat в области дистанционного зондирования Земли (ДЗЗ). Размеры антенны были определены и спроектированы согласно габаритным параметрам малого космического аппарата. Форма излучающей части была сформирована с использованием геометрического фрактала анизотропной структурой. С помощью программного пакета CST Microwave Studio были определены электродинамические, частотные характеристики и направленные свойства антенны. Результаты компьютерного моделирования демонстрируют, что разработанная концепция антенны имеет многодиапазонное свойство и соответствует всем параметрам, которые необходимы для приема и передачи данных в диапазонах S и Х. Также получено, что анизотропная фрактальная структура позволяет антенне иметь несколько рабочих частот.

Ключевые слова: патч-антенна, наноспутник, CubeSat, анизотропный фрактал, характеристики антенны.

N. Meirambekuly, B.A. Karibayev*, A.A. Temirbayev, A.K. Imanbayeva Al-Farabi Kazakh National University, Kazakhstan, Almaty *e-mail: beibitkaribaev7@gmail.com

S and X band patch antenna for CubeSat nanosatellites

The CubeSat concept has become very popular with both university groups and researchers, space agencies, governments and companies. CubeSat offers a fast and affordable way for a wide range of stakeholders to be active in space. Due to the high degree of modularity and widespread use of off-the-shelf commercial subsystems, CubeSat projects can be prepared for flight much faster than using traditional satellite schedules usually within one to two years. In this paper, we have considered a model of an S and X band patch antenna for CubeSat nanosatellites in the field of Earth remote sensing (ERS). The antenna dimensions were determined and designed according to the dimensions of the small spacecraft. The shape of the emitting part was formed using a geometric fractal with an anisotropic structure. Using the CST Microwave Studio software package, the electrodynamic, frequency characteristics and directional properties of the antenna concept has a multi-band property and meets all the parameters that are necessary for receiving and transmitting data in the S and X bands. It was also found that the anisotropic fractal structure allows the antenna to have several operating frequencies.

Key words: patch antenna, nanosatellite, CubeSat, anisotropic fractal, antenna characteristics.

Н. Мейрамбекұлы, Б.А. Кәрібаев*, Ә.Ә. Темірбаев, А.К. Иманбаева Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Қазақстан, Алматы қ. *e-mail: beibitkaribaev7@gmail.com

CubeSat наноспутниктеріне арналған S және X диапазонды патч антенна

CubeSat тұжырымдамасы университеттер топтары мен зерттеушілер, ғарыш агенттіктері, үкіметтер мен компаниялар арасында өте танымал болды. CubeSat мүдделі тараптардың кеңістігінде белсенді болудың жылдам әрі қолжетімді әдісін ұсынады. Модульділіктің жоғары деңгейіне және сатылымнан тыс коммерциялық ішкі жүйелердің кеңінен қолданылуына байланысты, CubeSat жобалары үшуға дәстүрлі спутниктік кестелерді қолданудан әлдеқайда жылдам дайындалуы мүмкін, әдетте бір-екі жылдың ішінде. Осыған орай, бұл жұмыста біз Жерді қашықтықтан зондтау (ЖҚЗ) саласындағы CubeSat наноспутниктеріне арналған S және Х диапазонды антеннаның үлгісін қарастырдық. Антеннаның өлшемдері шағын ғарыш кемесінің өлшемдеріне сәйкес анықталды және жобаланды. Шығаратын бөліктің пішіні анизотропты құрылымы бар геометриялық фракталдың көмегімен қалыптасты. CST Microwave Studio бағдарламалық жасақтамасының көмегімен антеннаның электродинамикалық, жиілік сипаттамалары мен бағыттық қасиеттері анықталды. Компьютерлік модельдеу нәтижелері антеннаның әзірленген тұжырымдамасының көп жолақты қасиетке ие екендігін және S және Х диапазонында мәліметтерді қабылдау мен беру үшін қажетті барлық параметрлерге сәйкес келетінін көрсетеді. Анизотропты фракталдық құрылым антеннаның бірнеше жұмыс жиілігіне ие болуына мүмкіндік беретіні де анықталды.

Түйін сөздер: патч антенна, наноспутник, CubeSat, анизотропты фрактал, антенна сипаттамалары.

Введение

За последние 10-15 лет низкоорбитальные малые космические аппараты (МКА) и наноспутники формата CubeSat (объёмом 1 л) активно разрабатываются и успешно эксплуатируются крупными космическими агентствами, университетами и компаниями [1-4]. Прототипы МКА очень быстро создаются и позволяют проводить испытания за короткое время с органичными затратами по сравнению с более крупными космическими аппаратами.

На сегодняшний день развитие элементной базы и новые разработки в телекоммуникационной части МКА позволяют CubeSat и другим небольшим спутникам передавать большие объемы данных, обмениваться данными из более отдаленных точек солнечной системы и обеспечивать сбор радиометрических данных для навигационных функций [5-7]. Во всех этих действиях немаловажную роль играют антенные устройства. Для успешного приема и передачи данных требуется соответствующие антенны по габаритам, электродинамическим характеристикам и другим параметрам. Кроме того, радиоканалы современных МКА обеспечивают связь в широком частотном диапазоне от УКВ до Ка и во многих случаях для каждого частотного диапазона используют отдельные бортовые антенны [8-11]. Использование несколько антенн одновременно создают дополнительные нагрузки для системы питания, увеличить массу полезной нагрузки, а также занимают больше место на поверхности аппарата. Поэтому создание компактных и многодиапазонных бортовых антенн для МКА является одной из актуальных задач.

Целью данной работы является разработка компьютерной модели микрополосковой патчантенны для наноспутников CubeSat. Предложенная антенна предназначена для наноспутников, используемых в системах дистанционного зондирования Земли (ДЗЗ). Во многих случаях такие спутники для передачи изображения используют высокоскоростные передатчики S и Х диапазонов. Миниатюризация рассматриваемой антенны была осуществлена с помощью фрактальной геометрии [12]. Выбор данного подхода объясняется двумя уникальными свойствами геометрических фракталов: заполнение пространства и самоподобие. Эти свойства дает возможность создавать, проектировать многодиапазонных и широкополосных антенн.

Материалы и методы

Плоскость излучающей части спроектирована в форме равнобедренного треугольника с деформированным основанием, согласно геометрии третьей иерархии анизотропного фрактала ZhF, который был впервые предложен Жанабаевым З.Ж. [13-14]. Форма данного фрактала формируется путем развития П-образных иерархических частей только в одном направлении, без деформации боковых звеньев (рис.1). В рассматриваемом анизотропном геометрическом фрактале с увеличением числа предфрактала части формируются только в одном направлении, при этом боковые звенья не деформируются.

Проектирование антенны произведено в программной среде CST Microwave Studio. Плоскость «земля» имеет срез формы, показанный на рисунке 1 (б). Питающая точка (порт) расположена в углу напротив основания треугольника. В качестве подложки использован стеклотекстолит FR-4 ($\varepsilon = 4.4$) с толщиной 1,6 мм (рис.2).



Рисунок 1 – Геометрические параметры антенны.

Результаты и обсуждение

На рисунке 3 показаны результаты моделирования коэффициента отражения антенны (параметр S_{11}) в частотном диапазоне 0÷10 ГГц. На резонансных частотах с центральными частотами f1 = 2.45 ГГц, f2 = 3.2 ГГц (входят в S диапазон) и f3 = 8,2 ГГц (X диапазон) величина обратных потерь намного ниже «-10 дБ». Достигнута ширина полосы импеданса «-10 дБ» на первой резонансной частоте 150 МГц (2400 МГц – 2550 МГц), на второй резонансной частоте 60 МГц (3160 МГц – 3220 МГц) и на третьей 265 МГц (8085 МГц – 8350 МГц). Кроме этих рабочих резонансов можно заметить еще два резонанса, но у них значения коэффициента отражения ниже порогового «-10дБ». Поэтому эти резонансы можно не рассмотреть из-за не согласованности антенно-фидерного тракта.



Рисунок 2 – Компьютерная модель антенны в среде CST Microwave Studio.

На рисунке 4 показан коэффициент стоячей волны по напряжению (КСВН) антенны также в диапазоне 0÷10 ГГц. Согласно графику, на всех резонансных частотах КСВН антенны ниже показателя 2 (f1-1,2; f2-1,4; f3-1,1), что показывает согласованность антенны с фидером по уровню волновых сопротивлений и ее работоспособность в данных частотах.



Рисунок 3 – S₁₁ параметр многодиапазонной патч-антенны

На рисунке 5 показаны результаты моделирования 2D диаграммы направленности (phi {0÷360}, theta=90) в полярной системе координат, построенные по максимальным значениям коэффициента усиления (КУ) на резонансных частотах в дальней зоне. На всех резонансных частотах антенна имеет форму «восьмерки», то есть имеет два основные лепестки. Данная особенность связана с геометрической формой плоскости «земля». На рисунке 6 приведены трехмерные (объемные) диаграммы направленности антенны. Плотность потока мощности на всех резонансах распределена достаточно равномерно, симметрично и без резких всплесков в виде боковых лепестков. По уровню КУ резонанс f2 в диапазоне S имеет отрицательное значение: – 2,37дБ, поэтому эта частота не подходит для использования. Остальные резонансы f1 (КУ=3,19дБ) и f3 (КУ=2,89дБ) полностью соответствуют для радиопередачи и приема.



Рисунок 4 – КСВН антенны



Рисунок 5 – 2D-диаграмма направленности антенны, (а) – 2,45 ГГц, (б) – 3,2 ГГц, (в) – 8,2 ГГц



Рисунок 6 – 3D-диаграмма направленности антенны, (а) – 2,45 ГГц, (б) – 3,2 ГГц, (в) – 8,2 ГГц.

Заключение

Результаты моделирования показали, что анизотропная фрактальная структура позволяет антенне иметь несколько рабочих частот. Выбранные нами геометрические параметры и структуры рассматриваемой патч-антенны для наноспутников CubeSat со своими электрическими длинами резонировали на S и X диапазонах. Первые два из них лежат в пределах S диапазона, третья – в диапазоне X. У всех них можно наблюдать низкие значения коэффициентов отражения (от -15дБ до -25дБ), которые обеспечивают эффективную работу за счёт согласованности антенно-фидерного тракта. Также результаты показали высокие коэффициенты усиления (3,19дБ и 2,89дБ) и отсутствие боковых лепестков (их наличие создают помехи наземным службам) в диаграмме направленности.

Рассматриваемая концепция антенны по габариту, весу, высокой механической прочностью и короткостью фидерного тракта, а также по электродинамическим характеристикам соответствует требованиям, предъявляемые к антеннам наноспутников ДЗЗ.

Благодарность

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Республики Казахстан в рамках гранта АР09057984 «Разработка и создание антенн S и X диапазонов для наноспутников CubeSat дистанционного зондирования Земли».

Литература

1 Saeed N., Elzanaty A., Almorad H., Dahriuj H., Tareq Y. Al-Naffouri, M. Alouini. CubeSat Communications: Recent Advances and Future Challenges //IEEE Communications Surveys & Tutorials. – 2020. – Vol.22. – P.1839-1862.

2 Aragon B., Ziliani M.G., Houborg R. et al. CubeSats deliver new insights into agricultural water use at daily and 3 m resolutions //Sci Rep. - 2021. - Vol. 11. - Art.No 12131.

3 Poghosyan A., Golkar A. CubeSat evolution: Analyzing CubeSat capabilities for conducting science missions //Progress in Aerospace Sciences. – 2017. – Vol.88. – P.59-83.

4 Villela T., Costa C., Brandao A., Bueno F., Leonardi R. Towards the Thousandth CubeSat: A Statistical Overview //International Journal of Aerospace Engineering. – 2019. – Vol. 2019. – Art. No 5063145.

5 Akyildiz I., Jornet J., Nie S. A New CubeSat Design with Reconfigurable Multi-Band Radios for Dynamic Spectrum Satellite Communication Networks //Ad Hoc Networks. – 2019. – Vol.86. – P.166-178.

6 Burleigh S., De Cola T., Morosi S., Jayousi S., Cianca E., Fuchs C. From Connectivity to Advanced Internet Services: A Comprehensive Review of Small Satellites Communications and Networks //Wireless Communications and Mobile Computing. – 2019. – Vol. 2019. – Art. ID 6243505.

7 Kovar P. Experiences with the GPS in Unstabilized CubeSat //International Journal of Aerospace Engineering. – 2020. – Vol.2020. – Art.ID 8894984.

8 Tubbal F., Raad R., Chin K., Butters B. S-band Planar Antennas for a CubeSat //International Journal on Electrical Engineering and Informatics. – 2015. – Vol. 7, (4). – P.559-568.

9 Tatomirescu A., Pedersen G. Compact S Band Antenna for CubeSat //2018 International Conference on Communications (COMM). – 2018. – P. 231-234.

10 Nascetti A., Pittella E., Teofilatto P., Pisa S. High-gain S-band patch antenna system for earth-observation CubeSat satellites //IEEE Antennas and Wireless Propagation Letters. – 2015. – Vol.14. – P.434-437.

11 Samsuzzaman M., Islam M.T., Nahar M.K., Mandeep J.S., Mansor F., Islam M.M. Circularly polarized high gain S band antenna for nanosatellite //International Journal of Applied Electromagnetics and Mechanics. – 2015. – Vol.47. – P.1039–1049.

Мандельброт Б. Фрактальная геометрия природы. – Институт компьютерных исследований, 2010. – 676 с.
Zhanabaev Z.Zh., Karibayev B.A., Imanbayeva A.K., Namazbayev T.A., Akhtanov S.N. Electrodynamic characteristics of

wire dipole antennas based on fractal curves //Journal of Engineering Science and Technology. - 2019. - Vol.14. - P.305-320.

14 Zhanabaev Z.Z., Ibraimov M.K., Imanbayeva A.K., Karibayev, B.A., Namazbayev, T.A. Fractal Antennas in Telecommunication Technologies //IEEE 12th International Conference on Application of Information and Communication Technologies, AICT 2018 – Proceedings. – 2018. – Art.No 8747153.

References

1 N. Saeed, A. Elzanaty, H. Almorad, H. Dahriuj, Tareq Y. Al-Naffouri, M. Alouini, IEEE Communications Surveys & Tutorials, 22, 1839-1862 (2020).

2 B. Aragon, M.G. Ziliani, R. Houborg et al., Sci Rep, 11, 12131 (2021).

3 A. Poghosyan, A. Golkar, Progress in Aerospace Sciences, 88, 59-83 (2017).

4 T. Villela, C. Costa, A. Brandao, F. Bueno, R. Leonardi, International Journal of Aerospace Engineering, 2019, 5063145 (2019).

5 I. Akyildiz, J. Jornet, S. Nie, Ad Hoc Networks, 86, 166-178 (2019).

6 S. Burleigh, T. De Cola, S. Morosi, S. Jayousi, E. Cianca, C. Fuchs, Wireless Communications and Mobile Computing, 2019, 6243505 (2019).

7 P. Kovar, International Journal of Aerospace Engineering, 2020, 8894984 (2020).

8 F. Tubbal, R. Raad, K. Chin, B. Butters, International Journal on Electrical Engineering and Informatics, 7 (4), 559-568 (2015).

9 A. Tatomirescu, G. Pedersen, 2018 International Conference on Communications (COMM), 231-234 (2018).

10 A. Nascetti, E. Pittella, P. Teofilatto, S. Pisa, IEEE Antennas and Wireless Propagation Letters, 14, 434-437 (2015).

11 M. Samsuzzaman, M.T. Islam, M.K. Nahar, J.S. Mandeep, F. Mansor, M.M. Islam, International Journal of Applied Electromagnetics and Mechanics, 47, 1039–1049 (2015).

12 B. Mandel'brot, Fraktal'naya geometriya prirody, (Institut komp'yuternykh issledovaniy, 2010), 676 p. (in Russ.).

13 Z.Zh. Zhanabaev, B.A. Karibayev, A.K. Imanbayeva, T.A. Namazbayev, S.N. Akhtanov, Journal of Engineering Science and Technology, 14, 305-320 (2019).

14 Z.Zh. Zhanabaev, M.K. Ibraimov, A.K. Imanbayeva, B.A. Karibayev, B.A., T.A. Namazbayev, Proc. IEEE 12th International Conference on Application of Information and Communication Technologies, 8747153 (2018).

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
Тюлемисов Ж., Исадыков А.Н., Бекбаев А. Расчет распадов дважды очарованных бар	К., Азнабаев Д.Т., Нурлан К. ионов	
2-бөлім Плазма физикасы	Section 2 Plasma Physics	Раздел 2 Физика плазмы
Исанова М.К., Коданова С.К., Бастыкова Исследование процесса рассеяния электро в магнитном поле	<i>Н.Х., Кенжебекова А.И.</i> она на ионе в плазме инерционного терм	юядерного синтеза
3-бөлім Конденсирленген күй физикасы және материалтану проблемалары. Наноғылым	Section 3 Condensed Matter Physics and Materials Science Problems. Nanoscience	Раздел 3 Физика конденсированного состояния и проблемы материаловедения. Нанонаука
Алдияров А.У., Соколов Д.Ю., Тыченгулова Колебательная спектроскопия тонких пле	а А., Ережеп Д. нок конденсатов смеси этанола с инертн	ым газом24
Kovanov A.V., Zhignovskaya D.V., Tsvetkov Scroll compressor. Analysis of calculation m	V.A., Pronin V.A. ethods	
Egizbek K.B., Kadyrzhanov K.K. Study of phase formation in Fe_2O_3 -Nd $_2O_3 \rightarrow$	NdFeO ₃ /Fe ₂ O ₃ nanocomposites as a result	of thermal annealing
Асильбекова А.М., Алдонгаров А.А., Иргиб Рассмотрение влияние самоагрегирования	<i>аева И.С.</i> я в наноразмерных кластерах CdS	
Усеинов Б.М., Солодовник А.А., Жумабаев Влияние индуктивности на параметры пл	а С.К. азменного фокуса в импульсном коаксиа	льном ускорителе
Комбаев К.К., Еламанов Д.С., Касенова А. Электролитті-плазмалық модификациядан жағдайы	Б., Қамзин Д.С., Токтарбаева Г.М. 1 кейін төмен көміртекті болаттың беткі	қабатының құрылымдық-фазалық
Федосимова А.И., Лебедев И.А., Дмитрие Особенности распределения событий по м от энергии столкновения и ассиметричное	ва Е.А., Ибраимова С.А., Бондарь Е.А., К иножественности вторичных частиц в за сти сталкивающихся релятивистских яде	<i>Срасовицкий П.М.</i> висимости гр
4-бөлім Бейсызық физика. Радиофизизика	Section 4 Nonlinear physics. Radiophysics	Раздел 4 Нелинейная физика. Радиофизика